



MARGOT PAULINO

Dr

margot@fq.edu.uy

Avda General Flores 2124 1
1800-Montevideo Uruguay
+59829291558

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas

Categorización actual: Nivel III (Activo)

Fecha de publicación: 06/11/2024
Última actualización: 06/11/2024

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química / Centro de Bioinformática - Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Química / Sector Educación Superior/Público / Centro de Bioinformática - Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y

Dirección: Instituto de Química - Facultad de Química - Avda General P. Flores 2124 - Montevideo - Uruguay / 11600

País: Uruguay / Montevideo / Montevideo

Teléfono: (+598) 29291558

Correo electrónico/Sitio Web: margot@fq.edu.uy www.detema.fq.edu.uy

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1987 - 1993)

Universidad de la República - Facultad de Química , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Relación estructura-actividad en compuestos nitro heterocíclicos con actividad tripanocida sobre Trypanosoma cruzi y otros tripanosomatdeos sensibles

Tutor/es: Andres Oscar Manuel Stoppani

Obtención del título: 1993

Palabras Clave: t cruzi, bioinformatica farmacoquimica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

GRADO

Química Farmacéutica (1976 - 1982)

Universidad de la República - Facultad de Química , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa:

Obtención del título: 1982

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

Formación complementaria

CONCLUIDA

POSDOCTORADOS

Estadías postdoctorales en el Trinity College Dublin (2005 - 2006)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Trinity College Dublin , Irlanda

Palabras Clave: Chagas, nuevos fármacos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / diseño de fármacos

Pasantías Postdoctorales en el Center for Biophysical Sciences and Engineering (2003 - 2004)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / University of Alabama at Birmingham , Estados Unidos

Palabras Clave: trypanothione reductase

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas, Química Médica

Pasantía posdoctoral en la Laurentian University, Laboratory of Theoretical Chemistry, Sudbury, Ontario (2001 - 2001)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Laurentian University , Canadá

Palabras Clave: dinámica molecular

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Estadía posdoctoral en el Departamento de Química UFSCar (1999 - 1999)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Sao Carlos , Brasil

Palabras Clave: dinámica molecular

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Estadía posdoctoral en la Estación experimental del Zaidín e Instituto Lopez-Neira (1999 - 1999)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Parasitología y Biomedicina "López - Neyra", España

Palabras Clave: bioinformática estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Pasantía posdoctoral. Physicochemical Department. Uppsala University (1966 - 1999)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Uppsala , Suecia

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Estadías posdoctorales de un mes en el IPP (1996 - 1996)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institut Pasteur Paris , Francia

Palabras Clave: Chagas, nuevos fármacos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / microcalorimetría

Pasantías posdoctorales. Physicochemical Department. Uppsala University (1995 - 1995)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Uppsala , Suecia

Palabras Clave: bioinformática estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Pasantía posdoctoral en el Institut de Genetique et Microbiologie de la Universidad Paris Dus Francia (1994 - 1994)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Université Paris Sud (XI) , Francia

Palabras Clave: Aspergillus nidulans DNA-CreA interactions

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Working Party on Computational Chemistry (1994 - 1994)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Université de Nancy 2 , Francia

Palabras Clave: computational chemistry

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

ETH,ZURICH (1994 - 1994)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Swiss Federal Institute of Technology in Zurich /

Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) Zürich , Suiza

Palabras Clave: structural bioinformatics

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Pasantía postdoctoral.Physicochemical Department. Uppsala University (1994 - 1994)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Univerisdad de Uppsala , Suecia

Palabras Clave: bioinformática estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Idiomas

Inglés

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

Francés

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

Español

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

Italiano

Entiende bien / Habla regular / Lee bien / Escribe regular

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, Diseño de compuestos Bioactivos

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática

CIENCIAS MÉDICAS Y DE LA SALUD

Ciencias de la Salud / Ciencias de la Salud

Actuación profesional

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Química / Centro de Bioinformática - DETEMA

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (08/2014 - a la fecha) Trabajo relevante

Profesor Titular 32 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 5
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (08/2009 - 05/2014)

Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti 32 horas semanales / Dedicación total
Es uno de los tres vínculos mas relevantes de mi actuación profesional.
Escalafón: Docente
Grado: Grado 4
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (08/2004 - 08/2009)

Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti 32 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 4
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (08/1999 - 08/2004)

Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti 32 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 4
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (11/1996 - 11/2001)

Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv 36 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (08/1997 - 08/1999) Trabajo relevante

Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti 32 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 4
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (11/1991 - 11/1996) Trabajo relevante

Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv 36 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (11/1989 - 11/1991)

Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv 36 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (02/1988 - 12/1989)

Profesor Adjunto 40 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (01/1988 - 12/1988)

Profesor Adjunto de Química Cuántica 36 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (01/1987 - 12/1987)

Profesor Adjunto de Química Cuántica 24 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (01/1986 - 12/1986)

Prof. Adjunto de Química Cuántica 24 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (01/1985 - 12/1985)

Prof. Adjunto Provisional de Química Cuántica 24 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (01/1983 - 12/1984)

Asistente 24 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Interino

Colaborador (04/1983 - 12/1983)

Asistente Honorario 20 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Honorario

Funcionario/Empleado (04/1979 - 12/1982)

Ayudante 15 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (04/1978 - 12/1979)

Ayudante de Físicoquímica 15 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Colaborador (08/1977 - 08/1978)

Ayudante Honorario 20 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (08/1977 - 12/1977)

Ayudante 8 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Colaborador (06/1976 - 06/1977)

Ayudante Honorario 20 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

CHAGASMEDCHEM-Diseño de Candidatos a ser desarrollados como Antichagásicos. (11/1993 - a la fecha)

CHAGASMEDCHEM. Diseño de moléculas candidatas a ser empleadas como quimioterápicos de la Enfermedad de Chagas, en base al estudio de mecanismos enzimáticos de defensa contra el stress oxidativo de parásitos y huéspedes. Desarrollo de formas farmacéuticas (nanoestructuras) conteniendo extractos de productos naturales con actividades antitripanosoma. Estudios de la expresión en *T. cruzi* de ciclofilina y su relación con inhibidores análogos de ciclosporina. Modelado tridimensional y validación de la estructura de: proteína nucleosomal del cromosoma de *Trypanosoma cruzi*, transalidasa y dehidrogenasa de alfa-aminoácidos hidroxiaácido aromáticos (AHADH). Esta línea de investigación ha sido financiada por SAREC (Swedish Agency for Research in Underdeveloped Countries), NASA (Administración Nacional de la Aeronáutica y del Espacio), CSIC UdelaR, principalmente.

10 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR, DETEMA/LaBioFarMol, Coordinador o Responsable

Equipo: E. ALVAREDA, H. PARDO, D FIGUEROA, Andres Camilo Ballesteros Casallas, P VIDOSSICH, GP MISCIONE, C.O. SALAS, M. GONZÁLES, K. VAZQUEZ, R. TAPIA, H. CERECETTO, O. TAPIA, BUA J, R. CARRARO, DENIS P, Federico Pablo IRIBARNE RESTUCCIA, S. AGUILERA-MORALES, M. DUBIN, C ORTIZ, M COMINI

Palabras clave: bioinformática estructural Chagas nuevos fármacos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

NUTRICAROT (10/2012 - a la fecha)

CAROT. Estrategias in silico, in vitro y empresariales aplicada a la modelización, análisis conformacional, isomería estructural de carotenoides y su implicancia en las interacciones y propiedades in vivo y al desarrollo de un nutraceutico en base a carotenoides

10 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR, DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural, Coordinador o Responsable

Equipo: A. GAMBARO, A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ, M. VEGA, R. RODRIGUEZ, C. LOPEZ, M.J. RODRIGO, V VELAZQUEZ, C STINCO, J. CANTERO

Palabras clave: Carotenoides CCD4

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

PROVITIS. Estudios experimentales e in silico de las propiedades antioxidantes de fenoles contenidos en productos naturales (03/2003 - a la fecha)

PROVITIS. El objetivo principal de esta línea de investigación es el estudio y obtención a escala piloto, de un concentrado patronizado de polifenoles a partir de propòleos y uvas, cuyo contenido fenòlico y capacidad antioxidante estarán documentados y certificados. Se están realizando los análisis de polifenoles totales en muestras vino tinto y propòleos, de capacidad antioxidante mediante técnicas de DPPH y ABTS+, obtención de un concentrado de vino tinto patronizado (contenido fijo de polifenoles totales), de un extracto hidro etanòlico de propòleos por método de extracción a reflujo (Soxhlet), mezcla de concentrados y extractos y monitoreo del contenido final de polifenoles y capacidad antioxidante de los concentrados obtenidos. En paralelo a los estudios de laboratorio húmedo, se realizan medidas de docking y dinámica molecular en modelos construidos a partir de datos cristalográficos de las enzimas asociadas a la antioxidación, la inflamación y la neuroprotección (ciclooxigenasa II y xantina oxidasa, factor transcripcional NFkB entre otros). Se estudian los modos y energías de interacción de los fenoles contenidos en los extractos obtenidos con estas dos enzimas, con el fin de brindarle a los extractos un valor agregado adicional, que indique probables acciones antiinflamatorias y antigotosas. Esta es una línea multidisciplinaria que integra además el desarrollo de productos liposomados, en coordinación con el Nanomat del Polo Tecnológico de Pando, y del análisis de sus propiedades sensoriales, en coordinación con el Laboratorio de Análisis sensorial del Departamento de Alimentos de la Facultad de Química. En la actualidad, estamos incorporados a un consorcio con las Empresas TRAVERSA SA y VINOLFI, a través de la herramienta ALIANZA-ANII, para el desarrollo de bioactivos caracterizados en su funcionalidad (antioxidante, antiinflamatoria y neuroprotectora) de extractos de orujos de uvas Tannat. Dicha asociación incluye investigadores del Instituto Pasteur Montevideo, de Investigaciones Biológicas Clemente Estable y Facultad de Química.

Aplicada

10 horas semanales

Facultad de Química - UdelAR, DETEMA / Centro de Bioinformática, Coordinador o Responsable
Equipo: G MOYNA, H. PARDO, A. GAMBARO, C. ROJAS, E. ALVAREDA, A. ROASCIO, M. PEARCE, L. CALDERÓN, CARMONA. P., RODRIGUEZ A, P. MIRANDA, M. DUBIN, S. AGUILERA-MORALES

Palabras clave: propóleos antioxidantes fenoles uvas liposomas ciclooxygenasa xantina oxidasa NFKB
Stress oxidativo

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural -
Estudios de funcionalidad de compuestos bioactivos

FABLOCK. Estudios in silico de proteínas de Echinococcus granulosus con diferentes funcionalidades (06/2000 - a la fecha)

Las estrategias de simulación in silico: modelado biomolecular, anclaje, dinámica molecular son aplicadas para dilucidar la estructura tridimensional y comportamiento en solución de proteínas con diferentes funcionalidades, las primeras de las estudiadas, transportadoras de ácidos grasos descubiertas a partir del genoma del Echinococcus granulosus. A partir de estas investigaciones, se pudo predecir la estructura tridimensional de proteínas hasta entonces desconocida, proponer sus modos y especificidad de unión a ligandos ácidos grasos y estudiar otras posibles funcionalidades como el disparo de señales de localización nuclear. Continuando con este emprendimiento, más recientemente se ha encarado el diseño y estudio de otro tipo de funcionalidad, mediante la modelación y validación de una estructura compleja que incluye una zona de interacción con ADN - funcionando como factor transcripcional - y dominios de estructura desconocida con otra funcionalidad.

4 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA, Coordinador o Responsable

Equipo: Ricardo Ehrlich, Saira CANCELA BRUNO, Gabriela ALVITE GAYE, A. ESTÉVES

Palabras clave: FABPs DBD Echinococcus granulosus ácidos grasos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Bioinformática Estructural

PEPTIDOS BIOACTIVOS: Estrategia combinada de abordajes experimentales e in silico para la identificación y la evaluación de mecanismos de acción de péptidos bioactivos provenientes de distintas fuentes alimentarias (07/2017 - a la fecha)

Las Enfermedades Crónicas No Transmisibles (ECNT) son la principal causa de enfermedad y muerte en el Uruguay, son responsables del 60 % de todas las defunciones. Un alto porcentaje de estas afecciones se puede prevenir o enlentecer su evolución a través de intervenciones de promoción de la salud (MSP, 2003). Una de las estrategias a seguir es la incorporación en la dieta de ingredientes con actividades biológicas que contribuyan a preservar y mantener la salud y el bienestar general. Los péptidos bioactivos son secuencias encriptadas en proteínas de distinto origen, generalmente inactivos, que luego de su liberación mediante fermentación, hidrólisis catalizada por proteasas (in vitro) o durante la digestión gastrointestinal (in vivo), pueden ser capaces de ejercer una o más actividades biológicas, dependiendo de sus características fisicoquímicas y estructurales. Los péptidos bioactivos constituyen actualmente una alternativa válida para reducir el riesgo de contraer ECNT; diversos estudios in vitro, in vivo y ex vivo han demostrado que péptidos de origen animal y vegetal exhiben diferentes propiedades fisiológicas, tales como antihipertensiva, antioxidante, hipocolesterolémica, antiproliferativa, inmunomoduladora, entre otras. En función de lo mencionado previamente, el objetivo de esta propuesta es utilizar datos generados, en estudios in vitro e in vivo, por integrantes del grupo de trabajo en el diseño de sistemas predictivos de obtención de péptidos bioactivos mediante el empleo de herramientas in silico. Esta combinación de herramientas in silico y el enfoque clásico de laboratorio, proporcionarán información que permitirá seleccionar las mejores fuentes proteicas que contienen el o los péptidos de interés, que enzimas podrían ser más eficientes para la obtención de dichos péptidos, o si un péptido podría mostrar una determinada actividad. Además serán utilizados para simular interacciones entre péptidos bioactivos con enzimas y receptores relacionados con mecanismos de acción específicos.

Fundamental

2 horas semanales

Facultad de Química - UdelAR, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA, Coordinador o

Responsable

Equipo: A. FERNÁNDEZ , N. BOLLATI , V. TIRONI , MC AÑÓN , A. NARDO , J. BAEZ , A. MEDRANO , Margot PAULINO

1986-2023. ACTUALIDAD DE LAS PRINCIPALES LINEAS DE INVESTIGACIÓN, DESARROLLO E INNOVACIÓN (TÍTULO E INVESTIGADORES ASOCIADOS) (08/2014 - a la fecha)

PRINCIPALES LINEAS DE INVESTIGACIÓN, DESARROLLO E INNOVACIÓN ACTUALES
MODELOS MULTIESCALA DESARROLLO DE MODELOS MULTIESCALA (Sergio Pantano, IPMON) DESARROLLO DE MODELOS PARA EL ESTUDIO DE ENFERMEDADES CARDIOVASCULARES (Graciela Borthagaray- UdelaR, Sergio Pantano IPMON) MACHINE LEARNING CREACIÓN DE REDES NEURONALES DEEP/REINFORCEMENT LEARNING PARA EL DESARROLLO DE MEDICAMENTOS. Consultores: Daniele Toti, Fabio Polticelli.
DESARROLLO DE PRODUCTOS NUTRACÉUTICOS ANTIOXIDANTES, ANTIINFLAMATORIOS Y/O NEUROPROTECTORES A PARTIR DE PRODUCTOS NATURALES. PROPOLEOS Y ORUJOS DE UVAS (Marcelo Comini, Mariella Bollati (IPMON), Carolina Etcheverry (IIBCE), Adriana Gámbaro (Cytal), Eduardo Boido (Cytal), Helena Pardo (PTP, UdelaR), Cecilia Da Silva (Centro Regional Tacuarembó, UdelaR), Jorge Cantero, Emiliana Fariña). PÉPTIDOS BIOACTIVOS DE AMARANTO Y LECHE (María Cristina Añón, Universidad de La Plata, Alejandra Medrano, Cytal, Facultad de Química) DIOXIDASAS DE CITRUS, HUMANAS, CAROTENOIDES, ANTIOXIDANTES Y SALUD OCULAR (María Jesus Rodrigo, INTA, Valencia, Antonio Meléndez-Martínez, Universidad de Sevilla, España) PRODUCTOS NUTRACÉUTICOS A PARTIR DE FLAVONAS DE SÍNTESIS: María Gabriela Ortega Universidad Nacional de Córdoba y MF Troncoso, UBA, Argentina). PRODUCTOS NUTRACÉUTICOS A PARTIR DE STEVIA REBAUDIANA: Nathalia Aceval, Universidad del Este Paraguay y actual PostDoc del Area Bioinformática) PÉPTIDOS BIOACTIVOS DE AMARANTO Y LECHE (María Cristina Añón, Universidad de La Plata, Alejandra Medrano, Cytal, Facultad de Química) DIOXIDASAS DE CITRUS, HUMANAS, CAROTENOIDES, ANTIOXIDANTES Y SALUD OCULAR (María Jesus Rodrigo, INTA, Valencia, Antonio Melendez-Martinez, Universidad de Sevilla, España) PRODUCTOS NUTRACÉUTICOS A PARTIR DE FLAVONAS DE SÍNTESIS: María Gabriela Ortega Universidad Nacional de Córdoba y MF Troncoso, UBA, Argentina). DESARROLLO DE MEDICAMENTOS - DRUG DESIGN ? INMUNOBIOINFORMÁTICA TRIPANOSOMIASIS: QUINONAS Y REDES NEURONALES (Marcelo Comini (IPMON), Cristian Salas, Ricardo Tapia (PUC, Chile), Gian Pietro Miscione (U de los Andes, Bogota?), Pablo Garcí?a (BCI, Chile), Carolina Mascayano (USACH, Chile). TRIPANOSOMIASIS: Compuestos organometálicos. (Dinorah Gambino, Leticia Pérez, Gonzalo Scalese (UdelaR)). TRIPANOSOMIASIS: Lactonas sesquiterpénicas (Manuela García/Viviana Nicota, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina) TRIPANOSOMIASIS: INHIBIDORES DE TRIPANOTIONA SINTETAZA? EbSelen/EbSulfur (Marcelo Comini, Andrea Medeiros) HIDATIDOSIS - ECHINOCOCCUS GRANULOSUS COMPLEJO II (Gustavo Salinas/Graciela Mahler, UdelaR) HISTONAS y G3PDH: (Alicia Fuchs, Instituto Fatale Chabern y UBA, Argentina) RECEPTORES NUCLEARES (Gabriela Alvite y Adriana Esteves FCien, UdelaR) INVESTIGACIONES SOBRE CÁNCER DERIVADOS DE PURINAS (Gian Pietro Miscione (U de los Andes Bogota?), Cristian Salas (PUC) y Derivados de pirazolopirimidinas (GP Miscione) DESARROLLO DE HERRAMIENTAS PARA EL DIAGNOSTICO DE VARIANTES DE SIGNIFICADO INCIERTO. Desarrollo de metodología de clasificación de variantes de significado incierto y no clasificadas mediante técnicas bioinformáticas y aplicación a la proteína Ataxia Telangiectasia-Mutated (P Esperón, BioClin, FQ, UdelaR)

Fundamental

30 horas semanales

Área Bioinformática - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR, Departamento DETEMA, Coordinador o Responsable

Equipo: M. PAULINO

Palabras clave: LINEAS DE INVESTIGACION ACTUALES

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / BIOINFORMÁTICA, BIOLOGÍA ESTRUCTURAL, MEDICINA QUÍMICA, DESARROLLO DE NUTRACÉUTICOS

CREA. Estudio de la interacción con ADN de factores transcripcionales de *Aspergillus nidulans* (03/2010 - 11/2018)

Estrategias in silico para el modelado biomolecular del factor transcripcional CreA y su unión a ADN. A partir del modelo tridimensional de CreA y un conjunto de mutantes, unidos a ADN, se realizan simulaciones de dinámica molecular en fase acuosa. El análisis del comportamiento simulado de los complejos en solución permite inferir patrones de contacto proteína-ADN y medir energías de interacción. Tales medidas se pueden correlacionar con medidas experimentales de unión proteína-ligando realizadas por investigadores que pertenecen a nuestro equipo de trabajo

5 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA, Coordinador o Responsable

Equipo: Claudio SCAZZOCCHIO, P. ESPERÓN

Palabras clave: CreA ADN

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

NEURONACH. Bioinformática Estructural aplicada al estudio de interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de receptores nicotínicos de acetil colina (03/2004 - 11/2012)

Existe un creciente interés en el desarrollo de agonistas para nAChRs neuronales debido a su potencial terapéutico como analgésicos y para el tratamiento de diferentes trastornos neurológicos y psiquiátricos relacionados con la alteración de la función colinérgica. Sin embargo, su potencial terapéutico, generalmente vinculado a la estimulación de los subtipos A4B2 y A7, como por ejemplo el diseño de nuevos fármacos antiparkinsonianos, está acompañado de una variedad de efectos secundarios no deseados, asociados fundamentalmente a la estimulación de los nAChRs ganglionares (principalmente A3B4). En este sentido el desarrollo de herramientas farmacológicas capaces de discriminar los diferentes subtipos de nAChRs abre la posibilidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que eviten o disminuyan los efectos no deseados. La reciente publicación en el Protein Data Bank del modelo cristalográfico del complejo nicotina - proteína de unión de acetilcolina de caracol, abre la posibilidad de generar modelos computacionales de los diferentes subtipos de nAChRs neuronales y con éstos, calcular las energías de unión de diferentes estructuras moleculares. Por otra parte, existe una gran cantidad de datos experimentales que permiten construir bases de datos de constantes de afinidad tanto para A7 como para A4B2 de distintos derivados de los agonistas prototípicos ((-)-Nicotina, (-)-Citisina, (-)-Anatoxina-A y (-)-Epiatidina). En este contexto, el proyecto se enfoca hacia la modelización de la interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de nAChRs, de manera tal que nos permita predecir la afinidad y especificidad de los diferentes ligandos y así, a través de un tamizaje virtual, proponer nuevos compuestos candidatos capaces de discriminar entre los diferentes nAChRs en estudio.

10 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA, Coordinador o Responsable

Equipo: Federico Pablo IRIBARNE RESTUCCIA, F. DAJAS, G. SILVA, T. GALAGHER, F. DEHEZ, CH. CHIPOT, P. EZZATI, Y. GONZÁLES, S. WONNACOTT, B.K. CASSELS, J.A. ABIN

Palabras clave: nAChR nicotina enfermedades neurodegenerativas citisina anatoxina farmacóforo QSAR docking MD FEP

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

ANTIBIOTICOS QUINOLÓNICOS. Bioinformática estructural aplicada al estudio del mecanismo de resistencia de antibióticos quinolónicos (11/2009 - 11/2010)

Estudio de las bases moleculares de la resistencia de antibióticos quinolónicos, mediante el diseño de proteínas transmembranales de *Neisseria gonorrhoeae* y la elucidación de factores determinantes de la unión y reflujo hacia el exterior de las bacterias, de dichas moléculas.

2 horas semanales

Facultad de Química - UdelAR, DETEMA/Centro de Bioinformática Estructural, Coordinador o Responsable

Equipo: ACEVEDO A, BORTHAGARAY G

Palabras clave: bioinformática estructural resistencia a antibióticos quinolónicos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Maestría en Bioinformática (03/2008 - a la fecha)

La Maestría en Bioinformática tiene como objetivos: Formación de RRHH de nivel de posgrado en Bioinformática y promoción de la interacción entre investigadores de las distintas vertientes que componen la Bioinformática. Este es un proyecto que abarca el desarrollo de la Bioinformática en forma simultánea con la formación de RRHH en esa área. -Sustentar la formación de profesionales bioinformáticos de alto nivel tendiente a la formación de una plataforma de alto nivel en esta área de conocimiento. -Promoción de la interacción entre los centros académicos formadores de RRHH

y los sectores empresariales (ej. industria Biotecnológica) generadores de demanda con vista a la futura inserción laboral.

10 horas semanales

CeBioinfo - DETEMA - Facultad de Química - Udelar, PEDECIBA - Udelar

Otra

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:42

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Comisión Académica de Posgrado, Uruguay, Apoyo financiero

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Federico Pablo IRIBARNE RESTUCCIA, M. VEGA, A MOMBRO (Responsable), M PAULINO (Responsable), M TORRE, F ALVAREZ, P EZZATTI, D WONSEVER, H NAYA, J TORT, E LESSA, J SOTELLO, B GARAT, Marco SCAVINO, P GARCIA, Alfonso VICENTE, G GUERBEROFF, I NUÑEZ, P BERMOLLEN, P SMIRCICH, M GONZALEZ, L MORENO

Palabras clave: Bioinformática Maestría

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Extracción, análisis e identificación de carotenoides

VITIS.ORUJOS.ALIANZA (11/2019 - a la fecha)

La industria vitivinícola en Uruguay genera grandes cantidades de residuos que no son aprovechados adecuadamente. Como parte del proceso de elaboración del vino tinto y en la etapa del prensado de la uva se genera un residuo llamado "orujo", el cual está constituido por hollejo, tallo de uva y semilla. En la persistente búsqueda de nuevas alternativas naturales para el desarrollo de nuevos productos que brinden mejor calidad de vida y promuevan la buena salud, los orujos han resultado de interés por su alto contenido de compuestos polifenólicos. Estos compuestos han sido asociados a propiedades antioxidantes, antiinflamatorias, neuroprotectoras y anticancerígenas. Como antecedentes de este proyecto y atendiendo a la necesidad de una mayor caracterización de los componentes fenólicos en los orujos, se han desarrollado métodos de extracción, caracterización bioquímica, analítica y bioinformática que posibilitan identificar el grupo de moléculas y sus funcionalidades. La presentación como extractos debidamente caracterizados tanto analíticamente como funcionalmente permitiría lograr productos comerciales con importantes propiedades nutraceuticas y farmacológicas. Como resultados del proyecto se definirá un protocolo de extracción transferible a la industria, también se generará una caracterización de componentes y ensayos de funcionalidad in vitro y celular, que permitirá reivindicar propiedades nutraceuticas y farmacológicas de los productos. Se generarán formulaciones para cuatro productos: un extracto líquido, uno en polvo con y sin microencapsulado y la propuesta de un producto nutraceutico en forma de bebida funcional. Esto apuntará a la generación de una spin-off de base tecnológica con participación de los investigadores y las empresas orientada a la producción a escala y la comercialización de este tipo de productos. Los impactos sobre la industria subyacen en la generación de productos de alto valor a partir de residuos de la industria vitivinícola atendiendo a las exigencias de pureza y calidad que exigen las normas nacionales e internacionales.

10 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA / Centro de Bioinformática

Desarrollo

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Especialización:2

Doctorado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Margot PAULINO (Responsable), Eduardo BOIDO BERMÚDEZ, Francisco CARRAU, M. Comini, J CANTERO, Juan Andres ABIN CARRIQUIRY, Helena PARDO MINETTI, Adriana GÁMBARO GARCÍA, F. TRAVERSA, A. GATTO

Palabras clave: ORUJOS DE UVAS VITIS VINIFERA FENOLES BIOACTIVOS

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

QUINONAS MULTI-DIANA PARA EL DESARROLLO DE FÁRMACOS TRIPANOSOMICIDAS (03/2019 - a la fecha)

Los tripanosomátidos del género Leishmania y Trypanosoma, son agentes etiológicos de importantes enfermedades como la del sueño (Trypanosoma brucei) y de Chagas (Trypanosoma cruzi) o la Leishmaniasis visceral infantil (Leishmania infantum) que también afecta a caninos. Todos ellos presentan ciclos de vida complejos en el que intervienen hospedadores mamíferos e insectos. Alrededor de 16 millones de personas están infectadas de Chagas, estimándose más de 20 mil muertes por año (Coura&Dias, 2009) en zonas endémicas de América Latina. La migración de millones de personas promovió la aparición de casos en otros continentes. Los dos fármacos desarrollados: Nifurtimox (Lampit®, Bayer) y Benznidazol (Rochagan®, Roche) presentan importantes efectos adversos, por lo cual se requieren nuevas alternativas de tratamiento. Por su lado, en el año 2000 se detectaron casos de leishmaniasis en la región. Brasil, Argentina y Paraguay han experimentado un aumento de su área de dispersión desde áreas rurales a urbanas y peri-urbanas. Desde el 2015 el Uruguay registró casos autóctonos de Leishmaniasis visceral canina, siendo el principal reservorio de esta parasitosis el perro doméstico. Hemos estudiado un conjunto de 4-arylloxy-quinonas que inhibieron el crecimiento de T.cruzi, algunas de ellas con bajos niveles de citotoxicidad. Confirmamos que inhiben no competitivamente a la tripanotona reductasa (TR) alterando las defensas oxidativas del parásito (Vera et al., 2016) y verificado que inhiben a la glucosa 6-fosfato deshidrogenasa de T.cruzi (G6PDH, fase oxidativa de la vía de las pentosas). Todas las evidencias sugieren que son capaces de actuar a través de mecanismos multi-diana. En esta propuesta se estudiará una serie amplificada de 4-arylloxy-quinonas variando sustituyentes halógenos, hidrocarbonados y nitrados. Se medirá su inhibición en TR y G6PDH y su reactividad frente a sondas redox. Para aquellas con IC50 < 10M, se estudiará su capacidad de inhibir el crecimiento in vitro en amastigotes T.cruzi Dm28c y L.infantum. Se comparará la reactividad en tripomastigotes de cepas Dm28c, INC-5 y NINOA. Las más activas se someterán a ensayos in vivo (Tácruzi). En simultáneo se realizarán estudios in silico (farmacóforos, descriptores como HOMO-LUMO e índices de Fukui entre otros, QSAR2D y 3D; anclaje reverso y directo; dinámica molecular). Se seleccionará el mejor candidato para el desarrollo de un compuesto tripanocida, validando su mecanismo de acción a través de la formación de radicales libres y/o a través de la inhibición de dianas involucradas, quedando a verificar una acción simultánea de inhibición enzimática y consumo de equivalentes de reducción (acción subversiva). Se conocerán las bases moleculares de su acción y su intervención en diferentes rutas metabólicas, con lo que, además de racionalizar su efecto como antitripanosomatídeos se propondrá su reposicionamiento como candidatos a fármacos para enfermedades diversas como otras tripanosomiasis o cáncer.

10 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado: 1

Especialización: 1

Doctorado: 1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Margot PAULINO (Responsable), C ORTIZ, M COMINI, C SALAS, K VAZQUEZ, Hugo CERECETTO MEYER, GP MISCIONE, AC BALLESTEROS

Abordaje in silico para la identificación y la evaluación de mecanismos de acción de péptidos bioactivos provenientes de distintas fuentes alimentarias FSDA_1_2017_1_143964 (05/2017 - 04/2020)

Se desarrolló conocimiento sobre las características estructurales asociadas a diferentes funcionalidades (capacidad antioxidante, antihipertensiva) mediante un enfoque multidisciplinario de estrategias in silico y experimentales, para la identificación y la evaluación de mecanismos de acción de péptidos bioactivos provenientes de distintas fuentes alimentarias

FSDA_1_2017_1_143964

10 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA- Bioinformática

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1
Equipo: M. PAULINO

CHAGASMEDCHIM.QUINO- Paranaftoquinonas contra el Mal de Chagas (03/2013 - 11/2018)

Este proyecto es el más reciente emprendimiento de investigación que continúa la búsqueda de nuevos candidatos para ser desarrollados contra el Mal de Chagas. Su objetivo general es el diseño de nuevos candidatos para el desarrollo de medicamentos contra el Mal de Chagas. Sus objetivos específicos incluyen síntesis de series de paranaftoquinonas, tamizaje virtual, estudios parasitológicos, bioquímicos, cristalográficos y propuestas de nuevos candidatos a ser desarrollados como medicamentos para el Mal de Chagas.

10 horas semanales

Facultad de Química - UdelAR, DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Financiación:

Universidad de la República, Uruguay, Cooperación

Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile, Cooperación

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: H. CERECETTO, R. TAPIA, C.O. SALAS, M GONZALEZ, VAZQUEZ, L KRAUTH-SIEGEL

Palabras clave: quinonas chagas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Físicoquímica

TARGETFISH.PHENOLS (03/2014 - 11/2017)

El objetivo principal de este proyecto fue desarrollar una estrategia de anclaje reverso para obtener una lista de posibles blancos de fenoles asociados a enfermedades neurodegenerativas.

10 horas semanales

Facultad de Química - UdelAR, DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Beca

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Beca

Equipo: Margot PAULINO

Palabras clave: fenoles quercetina

PROVITIS.NANO-Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas (06/2013 - 11/2016)

Proyecto destinado a continuar el desarrollo, investigación e innovación en la caracterización funcional de extractos de orujos de uvas en sus cualidades antioxidantes y antiinflamatorias

8 horas semanales

Facultad de Química - UdelAR, DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Financiación:

Universidad de la República, Uruguay, Remuneración

Equipo: P. MIRANDA, H. PARDO

Palabras clave: antiinflamatorios liposomas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Físicoquímica

NEURONACH.HPC-GPC-MD (11/2011 - 11/2014)

El Proyecto, diseñado en el marco de la línea de investigación NEURONACH, consiste en

desarrollar estrategias de High Performance Computing utilizando arquitecturas que incluyan Graphics Unity Processors (GPUs) para llevar a cabo dinámicas moleculares de largo alcance de sistemas complejos incluyendo proteínas membranas y solvente. La aplicación de tal estrategia será realizada a modelos de receptores nicotínicos de acetil colina humanos.

2 horas semanales

Facultad de Química - PEDECIBA , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Equipo: Y GONZÁLES , P PEZZATI

Palabras clave: dinámica molecular nAChR HPC GPUs

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / High Performance Computing

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

CreA: Estudios de interacciones ADN-proteína aplicados a proteínas de *Aspergillus nidulans* (03/2002 - 11/2012)

Este proyecto se inscribe en la línea DNA-PROT cuyo objetivo general consiste en estudiar la interacción de la proteína CreA, del hongo *Aspergillus nidulans* con ADN. Como objetivos específicos tiene principalmente dos: uno es el estudio por métodos experimentales de laboratorio húmedo la interacción de CreA y un conjunto de mutantes, con un oligonucleótido de 10 pares de bases. El segundo objetivo consiste en modelizar la estructura tridimensional de CreA y todos los mutantes a partir de el mismo modelo y realizar simulaciones de dinámica molecular de largo alcance de tales proteínas unidas a un modelo de oligómero. Finalmente, a través del estudio comparado de los valores de constantes de afinidad y de la estructura de los modelos de complejos y las energías de interacción calculadas, se investiga sobre las bases moleculares que definen el patrón de interacción y las diferentes fuerzas que operan entre proteína y ADN

3 horas semanales

Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Equipo: P. ESPERÓN , Claudio SCAZZOCCHIO

Palabras clave: *Aspergillus nidulans* ADN interacciones factores transcripcionales

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología molecular

NEURONACH.LBDD: diseño de nuevos compuestos a ser desarrollados como antiparkinsonianos basados en agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina (03/2010 - 11/2012)

El proyecto se basa en investigaciones desarrolladas previamente por nuestro grupo de investigación, en el marco de la línea de investigación NEURONACH. La propuesta se basa en el antecedente de que los receptores neuronales nicotínicos de acetilcolina son blancos terapéuticos promisorios para el desarrollo de nuevas herramientas farmacológicas para el tratamiento de diversos desórdenes neurológicos. Los receptores del subtipo $\alpha 4\beta 2$ son los más relevantes debido su abundancia y distribución, así como por las funciones fisiológicas que ellos modulan. Si bien se posee información sobre las características que hacen potente a un agonista nicotínico, no hay demasiadas evidencias a nivel estructural que puedan justificar tal comportamiento. Las estrategias de filtrado virtual a partir de bases de la base de datos Pubchem, dilucidación de farmacóforo y análisis cuantitativo estructura-actividad (QSAR), combinadas, permiten analizar en forma gráfica y estadística el tipo de propiedades asociadas a la estructura (descriptores) que puedan estar vinculados a la actividad.

8 horas semanales

Facultad de Química - PEDECIBA , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Maestría/Magister:1

Equipo: ABIN A, G. SILVA, A MILANO

Palabras clave: antiparkinsonianos Ligand Based drug design

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

NEURONACH.CYT-Exploración de nuevos agonistas nicotínicos con selectividad por subtipo y modelización computacional de la interacción ligando-receptor (03/2004 - 06/2011)

Existe un creciente interés en el desarrollo de agonistas para nAChRs neuronales debido a su potencial terapéutico como analgésicos y para el tratamiento de diferentes desordenes neurológicos y psiquiátricos relacionados con la alteración de la función colinérgica. Sin embargo, su potencial terapéutico, generalmente vinculado a la estimulación de los subtipos A4B2 y A7, está acompañado de una variedad de efectos secundarios no deseados, asociados fundamentalmente a la estimulación de los nAChRs ganglionares (principalmente A3B4). En este sentido el desarrollo de herramientas farmacológicas capaces de discriminar los diferentes subtipos de nAChRs abre la posibilidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que eviten o disminuyan los efectos no deseados. La reciente publicación en el Protein Data Bank del modelo cristalográfico del complejo nicotina - proteína de unión de acetilcolina de caracol, abre la posibilidad de generar modelos computacionales de los diferentes subtipos de nAChRs neuronales y con éstos, calcular las energías de unión de diferentes estructuras moleculares. Por otra parte, existe una gran cantidad de datos experimentales que permiten construir bases de datos de constantes de afinidad tanto para A7 como para A4B2 de distintos derivados de los agonistas prototípicos ((-)-Nicotina, (-)-Citisina, (-)-Anatoxina-A y (-)-Epibatidina). En este contexto, el proyecto se enfoca hacia la modelización de la interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de nAChRs, de manera tal que nos permita predecir la afinidad y especificidad de una serie de ligandos sintetizados con estructuras análogas a las (-) citisina la cual además fue tomada como prototipo para un tamizaje virtual que permitió proponer nuevos compuestos candidatos capaces de discriminar entre los diferentes nAChRs en estudio.

4 horas semanales

Facultad de Química - UdeLaR, DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Equipo: ABIN A (Responsable) , F. DAJAS

Palabras clave: nicotínicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y uvas: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo. (10/2008 - 10/2010)

El objetivo principal de este proyecto es el estudio y obtención a escala piloto, de un concentrado patronizado de polifenoles a partir de propóleos y uvas, cuyo contenido fenólico y capacidad antioxidante estarán documentados y certificados. Se están realizando los análisis de polifenoles totales en muestras vino tinto y propóleos, de capacidad antioxidante mediante técnicas de DPPH y ABTS+, obtención de un concentrado de vino tinto patronizado (contenido fijo de polifenoles totales), de un extracto hidro etanólico de propóleos por método de extracción a reflujo (Soxhlet), mezcla de concentrados y extractos y monitoreo del contenido final de polifenoles y capacidad antioxidante de los concentrados obtenidos.

16 horas semanales

Facultad de Química - UdeLaR, DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: CARMONA. P., S. AGUILERA-MORALES, L.A. CASTRO

Palabras clave: antioxidantes

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / antioxidantes en productos naturales

Investigación, desarrollo e innovación en base a vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo. (03/2008 - 06/2010)

PROVITIS.MEL-Esta propuesta de investigación, desarrollo e innovación, está inserta en el área de la Fitoquímica y su objetivo principal es la obtención de un extracto patentado a partir de vino tinto, con propiedades antioxidantes analizadas y certificadas.

20 horas semanales

Facultad de Química - UdelAR, DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: POZO. P., S. AGUILERA-MORALES, CARMONA. P., Y. RODRIGUEZ, AVALOS K, RODRIGUEZ A, NAVERO M

Palabras clave: antioxidantes

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / antioxidantes en productos naturales

FABPLOCK: estudio de proteínas transportadoras de ácidos grasos en cestodes (03/2000 - 11/2009)

El Proyecto, incluido en la línea de investigación del mismo nombre, tiene como objetivo general la profundización en el conocimiento de la función de las FABPs de *Echinococcus granulosus* e identificación de blancos potenciales para diagnóstico, desarrollo de drogas y vacunas. Como objetivos específicos: Rastreo de antagonistas de las EgFABPs mediante técnicas *in silico*, *in vitro* y posterior comprobación *in vivo*.

3 horas semanales

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Equipo: A. ESTÉVES

Palabras clave: dinámica molecular cestodes FABPs docking *Echinococcus granulosus* ácidos grasos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología molecular

CHAGASPACE: Structure based Drug Design and Evaluation of Trypanocidal natural compounds against Chagas Disease. (01/2001 - 01/2007)

Este proyecto, ag inscripto dentro de la línea de investigación CHAGASMEDCHIM, agrupó nuevas instituciones de diferentes países, a saber: Universidad Nacional de Costa Rica, Universidad EARTH (Costa Rica), Universidad de Birmingham, Alabama (USA), NASA (USA), Universidad de Santiago de Chile (UsaCh), Universidad Católica del Norte (UCN), Chile, Instituto Mario Fatała Chabén (Buenos Aires, Argentina) y la Universidad de la República (UdelAR). Se realizó un convenio multinacional a través del cual se desarrollaron investigaciones de búsqueda de nuevos compuestos activos contra la enfermedad de Chagas. Se realizaron "screenings" en las selva húmeda de Costa Rica y en el desierto de Atacama en Chile. Dichos extractos se analizaron en relación a su capacidad inhibitoria del crecimiento del parásito causante de la enfermedad de Chagas (*T. cruzi*), y de una enzima clave del stress oxidativo del tripanosoma, la tripanotona reductasa (TR). También, se realizaron estudios *in silico* de moléculas con actividad inhibitoria en TR y su contraparte mamífera, la glutatión reductasa (GR). Se realizaron reuniones anuales en las cuales los resultados fueron discutidos y los planes rediseñados.

20 horas semanales

Facultad de Química - UdelAR, DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable
Concluido
Alumnos encargados en el proyecto:
Pregrado:3
Maestría/Magister prof:2
Doctorado:2
Financiación:
Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo: E. ALVAREDA , S. AGUILERA-MORALES , F. IRIBARNE , R. CARRARO , O. TAPIA , GARCIA A , DE LUCAS L , KOHLMAN B , SEPULVEDA S
Palabras clave: Antichagásicos Biodiversidad tripanotiona reductasa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de drogas

PROPOLIS.CSIC-Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela (01/2005 - 01/2007)

La propuesta, incluida dentro de la línea de investigación PROVITIS, fue realizada en asociación con el Sector Productivo uruguayo (empresa TEPYVE, Sociedad Apícola Uruguaya, Fundación Zonamérica) consistió en la extracción de fenoles de propóleos y marcela y estudio de sus estructuras y propiedades antioxidantes.

20 horas semanales

Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Maestría/Magister:1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: M. DUBIN , E. ALVAREDA , S. AGUILERA-MORALES , CEDRES M , L. CALDERÓN , ROJAS CH

Palabras clave: propóleos antioxidantes

NEURODIABET.Modelizacion biomolecular: estudio de hormonas neuroendocrinas de interés en el área de salud, potenciales usos en el tratamiento de la obesidad y enfermedades neurodegenerativas (01/2006 - 01/2007)

Este proyecto consistió en simular mediante dinámica molecular en medio acuoso con una concentración de iones equivalentes a la del pH fisiológico, la estructura pequeñas hormonas neuroendocrinas, que son péptidos entre 30 y 40 , implicadas en la acción glucoreguladora, siendo por ello potenciales agentes terapéuticos en el control de diabetes y obesidad.

10 horas semanales

Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Especialización:1

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: C. DONNAMARÍA (Responsable)

Palabras clave: diabetes obesidad hormona neuroendocrina

CHAGASMEDCHIM.SARECNET-Network for Research and Training in Parasitic Diseases at the Southern cone of Latin America. (01/1999 - 01/2001)

Este emprendimiento fue desarrollado en base a la cantidad de recursos humanos especializados en el estudio de enfermedades parasitarias que se generaron durante la ejecución del proyecto anteriormente financiado por SAREC. En este caso, se consolidó una Red Temática para la formación de nuevos recursos humanos que pudieran seguir colaborando en el área de las enfermedades parasitarias en el cono Sur de Latino América.

10 horas semanales

Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable
Concluido
Financiación:
Institución del exterior, Cooperación
Equipo:
Palabras clave: parasitos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Desarrollo de drogas

CHAGASMEDCHIM.SAREC-Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease Specific Action of New Drugs Against Flavoenzyme of the Parasitic Related Organism and the Mammalian Host. (01/1991 - 01/1999)

Este fue el primero de nuestros emprendimientos dedicados al desarrollo de nuevas drogas antichagásicas. Se organizaron bases de datos, conteniendo estructuras moleculares con información de actividades antitripanosoma (como nitrofuranos), se calcularon y midieron sus propiedades fisicoquímicas y se realizaron estudios de la correlación estructura-actividad (QSAR). También, se implementaron las metodologías para el estudio gráfico y simulación de enzimas claves implicadas en los mecanismos tripanocidas, en este caso, en los mecanismos de stress oxidativo parásito y mamífero, como lo son la tripanotiona reductasa y la glutatión reductasa, respectivamente. Finalmente, se implementaron los estudios dirigidos a conocer la forma de unión de las drogas ya estudiadas por QSAR y las enzimas claves antes mencionadas, generándose complejos biomacromoleculares que se sometieron a estudios de anclaje (docking) y dinámica molecular.

20 horas semanales
Facultad de Química - UdelaR, DETEMA/LaBioFarMol
Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Especialización:2

Maestría/Magister prof:1

Doctorado:1

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: O. TAPIA , STOPPANI AOM , N. HIKICHI , M. HANSZ

Palabras clave: Antichagásicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Desarrollo de drogas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

CHAGASMEDCHIM.CONICYT- Diseño de medicamentos antichagásicos selectivos (04/1994 - 04/1996)

Estudios de la relación estructura actividad de compuestos nitrofuránicos en las enzimas clave tripanotiona y glutatión reductasa, utilizando herramientas de bioinformática estructural

20 horas semanales

Facultad de Química - UdelaR, DETEMA/LaBioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Especialización:2

Maestría/Magister prof:1

Equipo: F. IRIBARNE , O. TAPIA , STOPPANI AOM , N. HIKICHI , M. HANSZ

Palabras clave: Antichagásicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Desarrollo de drogas

CHAGASMEDCHIM.CSIC-Modelado Gráfico y Estudio de las Propiedades Dinámicas de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. (06/1993 - 06/1995)

Este proyecto forma parte de una serie de propuestas englobadas en un objetivo único que es el estudio in silico de biomoléculas asociadas a enfermedades parasitarias. En este caso, se desarrollaron las metodologías y protocolos para el modelado Gráfico y estudio mediante Dinámica Molecular de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. Ejemplo de ello: modelado y estudio de interacciones entre enzimas claves como tripanotona reductasa y glutatión reductasa, y sus sustratos naturales (tripanotona y glutatión).

20 horas semanales

Facultad de Química - Udelar, DETEMA/LaBioFarMol

Desarrollo

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Especialización:2

Doctorado:1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: O. TAPIA, STOPPANI AOM, N. HIKICHI, M. HANSZ

Palabras clave: Antichagásicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de drogas

CHAGASMEDCHIM.START-Diseño de nuevas drogas antichagásicas modelando su actividad frente a oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario (08/1991 - 12/1993)

Esta propuesta fue la primera de un conjunto de proyectos que conforman hasta la actualidad la línea de investigación CHAGASMEDCHIM, dedicada a modelado y estudio por métodos in silico, de series de estructuras moleculares que pudieran luego de su selección a través de nuestra investigación, ser sugeridas como candidatas para el desarrollo de drogas antichagásicas. Las enzimas clave utilizadas para tal fin fueron oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario, y especialmente tripanotona y glutatión reductasa.

20 horas semanales

Facultad de Química, DETEMA / LabioFarMol

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Especialización:2

Maestría/Magister prof:2

Equipo: O. TAPIA, STOPPANI AOM, N. HIKICHI, M. HANSZ

Palabras clave: Antichagásicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de drogas

DOCENCIA

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2014 - a la fecha)

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Taller de Simulaciones Biomoleculares, 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Maestría en Bioinformática (09/2013 - a la fecha)

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Bioinformática Estructural - Bioinformática II, 8 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2014 - a la fecha)

Doctorado
Responsable
Asignaturas:
Diseño de Compuestos Bioactivos, 6 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (07/2013 - 07/2013)

Doctorado
Organizador/Coordinador
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2013 - 06/2013)

Doctorado
Responsable
Asignaturas:
Taller de Simulaciones Biomoleculares, 6 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2013 - 06/2013)

Doctorado
Responsable
Asignaturas:
Diseño de Compuestos Bioactivos, 6 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (06/2013 - 06/2013)

Doctorado
Organizador/Coordinador
Asignaturas:
Solving complex biological problems using free-energy calculations, 50 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Educación Permanente (04/2013 - 04/2013)

Especialización
Organizador/Coordinador
Asignaturas:
Extracción, separación e identificación de carotenoides: carotenoides en alimentación, nutrición y
salud, 21 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica/ Carotenoides

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (09/2012 - 12/2012)

Doctorado
Responsable
Asignaturas:
Bioinformática Estructural - Bioinformática II, 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (05/2012 - 07/2012)

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Diseño de Compuestos Bioactivos, 8 horas, Teórico-Práctico

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2012 - 05/2012)

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Taller de Simulaciones Biomoleculares, 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Maestría en Bioinformática (09/2011 - 12/2011)

Maestría

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Bioinformática II, 6 horas, Teórico-Práctico

Maestría en Bioinformática (03/2011 - 06/2011)

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Diseño de Compuestos Bioactivos, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Maestría en Bioinformática (09/2010 - 12/2010)

Maestría

Responsable

Asignaturas:

Diseño de Compuestos Bioactivos, 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Maestría en Bioinformática - PEDECIBA (09/2010 - 09/2010)

Maestría

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

NAMD-FEP, 40 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (03/2010 - 06/2010)

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Diseño de Compuestos Bioactivos, 8 horas, Teórico-Práctico

Maestría en Bioinformática - PEDECIBA (06/2010 - 06/2010)

Maestría

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

NAMD, 30 horas, Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Química Farmacéutica (07/2007 - 12/2007)

Grado

Asignaturas:

Bioinformática Estructural, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática, Biomoléculas

Química Farmacéutica (03/2004 - 08/2007)

Grado

Asignaturas:

Introducción a la Bioinformática, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática

Doctorado en Química (03/1998 - 08/2006)

Doctorado

Asignaturas:

Modelado Biomolecular, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacología, Biomoléculas, Modelado Molecular

(06/2005 - 06/2005)

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Minicurso Apiterapia impartido durante el 1er Congreso de Apicultura del Mercosur. Punta del Este. 24-26 Junio 2005., 4 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

(02/2004 - 02/2004)

Especialización

Invitado

Asignaturas:

2.2.3.1 Farmacología y Modelado biomolecular aplicado al diseño de drogas para la enfermedad de Chagas. Febrero 2004. Centro de Capacitación y Perfeccionamiento Docente Prof. Juan E. Pivel Devoto, Montevideo, Uruguay., 8 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

(12/2003 - 12/2003)

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Investigación y desarrollo de fármacos antiprotozoarios: Estado Actual y nuevas Estrategias. Curso Regional Investigación y Desarrollo de Fármacos Antiprotozoarios: estado actual y nuevas estrategias. Diciembre- 2003 AMSUD-Pasteur. Montevideo, 8 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

(09/1998 - 09/1998)

Técnico nivel superior

Invitado

Asignaturas:

Estructura Biomacromolecular. Noviembre 1998. Dictado en el Ciclo de los Sábados para la Enseñanza de la Química y sus Aplicaciones., 4 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

(11/1997 - 11/1997)

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

Mecánica, Dinámica y Farmacología Molecular, Reactividad Enzimática en Sitios Activos. Noviembre 1997. Universidad Federal de Sao Carlos., 10 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

(10/1997 - 10/1997)

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

"Modelado Molecular. Universidad de Chile Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Octubre 1997, 20 horas, Teórico-Práctico

(09/1997 - 09/1997)

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

QUI.300-5.97 Topicos en Físico-Química: Química Computacional aplicada al Modelagem Molecular (Módulo 2). Universidad Federal de Sao Carlos. Septiembre 1997., 10 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

Doctorado en Química (03/1991 - 08/1997)

Doctorado

Asignaturas:

Modelado Molecular, 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacología, Modelado Molecular

(05/1997 - 05/1997)

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Química Computacional Aplicada a Modelagem Molecular: una introducao. Universidad Federal de Sao Carlos. Mayo 1997, 20 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

(09/1996 - 09/1996)

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

2.2.2.2.5 Introducción al Modelado Molecular. Universidad de Chile. Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Septiembre 1996, 30 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

(08/1996 - 08/1996)

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

2.2.2.6 Modelado Molecular. Universidad de Chile. Facultad de Ciencias. Agosto 1996, 40 horas, Teórico-Práctico

Química Farmacéutica (03/1988 - 12/1990)

Especialización

Asignaturas:

Farmacología Cuántica, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacología, Química Cuántica

Química Farmacéutica (03/1976 - 03/1990)

Grado

Asignaturas:

Mecánica Cuántica, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Docking, Modelado Biomolecular, inhibición enzimática, flavonoides

(10/1989 - 10/1989)

Técnico nivel superior

Invitado

Asignaturas:

Diseño de fármacos asistido por computadoras. Octubre 1989. Curso Internacional de Química.

Nivel Superior. En el marco del Centenario de la Asociación de Química y Farmacia del Uruguay., 4 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

Química Farmacéutica (03/1978 - 03/1989)

Grado

Asignaturas:

Química Cuántica, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Cuántica

Química Farmacéutica (03/1988 - 08/1988)

Especialización

Asignaturas:

Investigación en el diseño de compuestos antichagásicos: Síntesis, estructura, bioquímica y teoría, 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas, diseño de drogas

(12/1987 - 12/1987)

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Diseño de Agentes Antichagásicos. Facultad de Química. 12-19 Diciembre 1987, 32 horas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química

Química Farmacéutica (03/1986 - 08/1986)

Grado

Asignaturas:

Simetría Molecular y Teoría de Grupos, 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Cuántica, Teoría de Grupos, Simetría Molecular

Química Farmacéutica (03/1978 - 08/1978)

Grado

Asignaturas:

Espectroscopía Molecular, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Cuántica, Espectroscopía

EXTENSIÓN

(03/2014 - a la fecha)

Facultad de Química - UdelAR, DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

4 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biología
Humana

Tutor del Proyecto de Extensión estudiantil PEB (Proyecto de Extensión en Bioinformática) realizado con el Liceo IPOLL de Salto (03/2011 - 03/2012)

Facultad de Química, Centro de Bioinformática Estructural

2 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Construir, mirar y transformar moléculas jugando. Proyecto de Extensión realizado en conjunto con la Estuela Numero 35 Guatemala de Montevideo (07/2011 - 12/2011)

Facultad de Química - PEDECIBA, Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

1 hora

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

GESTIÓN ACADÉMICA

Integrante Titular de la Comisión de Maestría (03/2010 - a la fecha)

PEDECIBA, Maestría en Bioinformática

Gestión de la Enseñanza

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Titular por el orden Docente (03/2010 - a la fecha)

Facultad de Química, Comisión de Dedicación Total

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural

Coordinadora de la subárea Físicoquímica (06/2013 - a la fecha)

PEDECIBA, QUÍMICA

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica

Coordinadora de la Maestría en Bioinformática (06/2011 - 07/2019)

PEDECIBA, Maestría en Bioinformática

Gestión de la Enseñanza

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Titular por los investigadores de la Comisión Coordinadora del Área (02/2011 - 11/2014)

Facultad de Química - PEDECIBA, PEDECIBA Química

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

Representante titular por los G 3,4 y 5 del departamento (03/2010 - 11/2014)

Facultad de Química, DETEMA

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Titular por el orden Docente (03/2010 - 08/2012)

Facultad de Química, Claustro de la Facultad de Química

Participación en cogobierno 2 horas semanales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - CHILE

Pontificia Universidad Católica de Chile / Facultad de Química

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**Profesor visitante (09/2013 - 12/2013)**

Profesor visitante 40 horas semanales

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/ENSEÑANZA SUPERIOR - CHILE

Fac de Ciencias / Departamento de Química y Farmacia

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**Profesor visitante (03/2008 - 03/2010)**

Académico 44 horas semanales / Dedicación total

ACTIVIDADES**LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN****PROVITIS. Estudio de las propiedades antioxidantes de productos naturales autóctonos de Chile y Uruguay (03/2008 - 02/2010)**

Extracción de fenoles a partir de propóleos, uvas y productos obtenidos de ellas uruguayos y chilenos. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por

diferentes metodologías (Folin Ciolcateu, HPLC, HPLS-MS índice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamento de Química y Farmacia, Coordinador o Responsable
Equipo: POZO. P., CARMONA. P., Y. RODRIGUEZ, ASENSIO M., V. ESPINOSA, REYES M, KESTERNICH V, STEGEN S, S. AGUILERA-MORALES, RODRIGUEZ A, H HRZICH

Palabras clave: antioxidantes, propóleos, QSAR antiinflamatorios antigotosos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Antioxidantes, QSAR, Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

NEURO.UCN-Bioinformática Estructural aplicada a enfermedades neurodegenerativas (03/2008 - 02/2010)

Estudios in silico de receptores asociados a enfermedades neurodegenerativas

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamento de Física, Coordinador o Responsable

Equipo: ABIN A, CASSELS B, F. DAJAS, PANZETTI F

Palabras clave: receptores nicotínicos citosínicos parkinson problemas cognitivos alzheimer

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de drogas antiparkinsonianas

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

VITIS.UCN-MEL-Desarrollo de antioxidantes a partir de vinos chilenos (03/2008 - 03/2010)

El proyecto tuvo como objetivo el desarrollo de extractos de productos naturales con alto valor agregado. Como actividades específicas tuvo: extracción de fenoles a partir de mezclas de vinos chilenos. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciolcateu, HPLC, HPLS-MS índice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamento de Química y Farmacia y Física

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: S. AGUILERA-MORALES, R NELSON, K AVALOS, NAVERO M, KESTERNICH V, Y. RODRIGUEZ

Palabras clave: antioxidantes vinos chilenos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

PROVITIS-MEL (03/2008 - 03/2010)

El proyecto tuvo como objetivo el desarrollo de extractos de productos naturales con alto valor agregado. Como actividades específicas tuvo: extracción de fenoles a partir de propóleos Uruguayos, vino, orujos y borras de uvas Chilenas. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciolcateu, HPLC, HPLS-MS índice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Departamento de Química y Farmacia

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:4

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: REYES M , H HRZICH , K AVALOS , NAVERO M , V. ESPINOSA , Y. RODRIGUEZ , S. AGUILERA-MORALES , C. ACUÑA

Palabras clave: propoleos uruguayos uvas chilenas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / obtención de antioxidantes y antiinflamatorios a partir de productos naturales

CQTEQUINAS.UCN-Catequinas de plantas autóctonas uruguayas y chilenas (03/2008 - 03/2010)

Extracción de catequinas a partir de plantas autóctonas uruguayas y chilenas. Desarrollo de procesos extractivos y analíticos de contenido y capacidad antioxidantes. estudio del efecto de los extractos a nivel del metabolismo endógeno y sometido a situaciones patológicas

1 horas semanales

Facultad de Ciencias , Departamentos de Química y Física

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Financiación:

Institución del exterior, Otra

Equipo: NAVERO M , KESTERNICH V (Responsable)

Palabras clave: plantas autóctonas catequinas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo (03/2008 - 03/2010)

El proyecto consistió en la recolección de 19 muestras de propóleos uruguayos, vinos chilenos, orujos y borras de vinos, a partir de los cuales se desarrollaron mezclas con alto contenido en polifenoles. La optimización de los procesos extractivos se hizo en base a medidas de la cantidad de fenoles totales (Folin Ciocalteu), capacidad antioxidantes (ABTS, DPPH) y medidas enzimáticas (xantin oxidasa). complementariamente, se investigaron los modos de unión y energías de unión por anclaje molecular de xantin oxidasa y los fenoles contenidos en los extractos.

10 horas semanales

Facultad de Ciencias , Departamentos de Química, Química y Farmacia y Física

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: K AVALOS , NAVERO M , Y. RODRIGUEZ , S. AGUILERA-MORALES , POZO. P.

Palabras clave: antioxidantes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

DOCENCIA

(03/2008 - 03/2010)

Grado

Asignaturas:

Farmacología II, 6 horas, Teórico-Práctico

Química Farmacéutica III, 8 horas, Teórico-Práctico

Bioinformática Estructural, 6 horas, Teórico-Práctico

Farmacología I, 6 horas, Teórico-Práctico

Farmacología III, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Docking, Modelado Biomolecular, inhibición enzimática, flavonoides

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacología, Química Farmacéutica

OTRA ACTIVIDAD TÉCNICO-CIENTÍFICA RELEVANTE

Especialista convocada para consolidar enseñanza, investigación y extensión en Química Farmacéutica, bajo un proyecto financiado por un programa del MECESUP(Programa de Mejoramiento de la Calidad y Equidad de la Educación Superior) - CHILE (03/2008 - 03/2010)

Universidad Católica del Norte - CHILE, Facultad de Ciencias

40 horas semanales

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 16 horas

Carga horaria de investigación: 20 horas

Carga horaria de formación RRHH: 12 horas

Carga horaria de extensión: 2 horas

Carga horaria de gestión: 10 horas

Producción científica/tecnológica

Mi labor: liderar y consolidar corporativamente a la Bioinformática en UdelaR y otras Universidades/Institutos, para el fortalecimiento y construcción institucional de capacidades de investigación, desarrollo e innovación.

Mi vocación se ha focalizado en la investigación, enseñanza, gestión, cogobierno, extensión y construcción institucional, pilares de mi rol como Prof. Titular de la Facultad de Química, UdelaR.

Mi Misión:

Participar activa y sinérgicamente promoviendo mi propio desarrollo y el de mi entorno logrando vínculos sólidos entre la Bioinformática, Medicina Química, Ciencias de la vida, Informática e Inteligencia Artificial

Consolidar al Área Bioinformática mediante el fortalecimiento las cooperaciones entre sus integrantes (G4 Profesor Libre, G3 postdoctoral, cinco G2 Asistentes/becarios, tres Postgraduandos/pasantes, y 3 pasantes externos) e incorporar y delegar desde mi posición de G5 y como líder, promocionando una trama de vínculos que espero se refuerce y agrande con el tiempo y la sinergia.

Líneas de investigación actuales:

Estudio de mecanismos de acción: desbalances de stress oxidativo, inflamación, procesos neurodegenerativos, cáncer

Estudios on target de blancos farmacológicos

Estructuras de compuestos bioactivos investigadas: fenoles (orujos, propóleos y sintéticos), carotenoides/dioxigenasas (citrus/humanas), péptidos (lácteo/vegetales); moléculas sintéticas: quinonas, pirazolopirimidinas, derivados de nucleótidos.

Amplificación de espacios químicos mediante redes generacionales previamente entrenadas y reforzadas on resultados de investigaciones previas.

Campos farmacológicos abordados: diseño de bioactivos y dilucidación de mecanismos de acción para cáncer (colonorectal, leucemia, inflamación, neuroritección, anticancerígenos, tripanosomiasis, hidatidosis, inmiunobioinformática (hidatidosis, desarrollo de vacunas), daño cardiovascular (fibrinas nitrosadas), Variantes de clasificación indefinida (VUS, diagnóstico precoz de cáncer), nutracéuticos y desarrollo de alimentos funcionales y nutracéuticos.

Formación de RRHH:

Orientadora de 33 Tesis (24 concluídas), de Doctorado, Maestría y Grado. Actualmente dirijo 4 Maestrías 5 Doctorados. Se espera tener en el 2024 3 egresos (dos Maestrías y un Doctorado).

Publicaciones:

De un total de 86 artículos/capítulos (correspondiente en más del 50%), 20 en el período y mas de 120 (40 en el período) proceedings/conferencias en eventos nacionales e internacionales. Conferencista invitada (2-3 veces al año) en eventos internacionales.

Participación en comités científicos internacionales, tribunales y comisiones evaluadoras. Review Editor del Editorial Board of Biological Modeling and Simulation (specialty section of Frontiers in Molecular Biosciences and Frontiers in Applied Mathematics and Statistics)

Vínculos académicos regionales e internacionales:

Gestión y coordinación de cooperación y proyectos de investigación, desarrollo e innovación financiados por fuentes nacionales e internacionales. Últimos cinco años: vínculos en Uruguay, Chile, Argentina, Colombia, Italia y España. En los últimos cinco años, a través de un plan que incluyó 13 paquetes de trabajo en los que estuvo involucrada la academia y la empresa, hemos fortalecido nuestros vínculos locales, desarrollando conocimiento y publicando con numerosos grupos de nuestra Facultad de Química (departamentos DEC, DepBio, DQO, BioClin), Facultad de Ciencias, IPMON e IIBCE. Dentro del circuito propuesto, se están considerando la formalización y protección de la propiedad intelectual involucrada.

Vínculos con empresas y proyección de escalado y producción industrial de productos desarrollados:

Exportadores de Miel y Propóleos (Urimpex S.A.); Empresas Vitivinícolas (Loncomilla-San Javier-Chile), Bodegas Carrau, Amendola-Boido; Traversa y Vinolfi. En los últimos 4 años se ha desarrollado un vínculo sólido con empresas, habiendo cerrado hace un mes exitosamente una fase de investigación, desarrollo e innovación para la generación de productos de alto valor agregado a partir de residuos industriales (orujos de uvas), lo que ha dado paso a una segunda fase, mediante un estudio de prefactibilidad técnica y económica, para el escalado de productos en diversos campos de aplicación (alimentos funcionales, prevención y control de salud, nutraceuticos, cremas antiinflamatorias, antioxidantes).

Extensión: actividades-puente con Liceo No.1 IPOLL/Salto y Escuela Guatemala-Montevideo)

Proyectos de investigación y desarrollo:

23 proyectos diseñados y financiados (SAREC, Conicyt, NASA, CSIC I+D, CSIC - VUSP, ANII). En los últimos 5 años, diseño de tripanosomátidos (CSIC I+D), de péptidos bioactivos (FSDA-ANII), de fenoles bioactivos (orujos de uvas Tannat, ALIANZA con Empresas - ANII) y Maestría en Bioinformática (CAP-UdelaR) y Diseño y Fabricación de kits de muestreo COVID-19 (Rectorado UdelaR - Fondo COVID).

Construcción Institucional:

Dirección del Área Bioinformática del departamento DETEMA (Facultad de Química-UdelaR). Instalación del Centro de Bioinformática (CeBioinfo) con herramientas computacionales para el Diseño y simulación del comportamiento de Biomoléculas y Compuestos Bioactivos.

Enseñanza y construcción institucional para la Enseñanza a todos los niveles de las Bioinformáticas:

Diseñadora de 7 asignaturas de grado y 6 de posgrado. Imparto entre el 30 y el 43% en 8 de ellas. Responsable y gestora de cursos de programación python (niveles inicial e intermedio) y Deep Learning.

Proponente y participación como titular en los grupos de diseño e implementación de dos carreras nuevas: Licenciatura y Doctorado en Bioinformática, con lo cual tenemos la misión de completar la formación de competencias en Bioinformáticas desde el grado hasta el nivel mas alto de posgrado.

Cogobierno universitario:

Consejo Facultad de Química Suplente (orden docente) hasta el 2022. Suplente grupo de trabajo RRHH (CFQ); Comisión de Dedicación Total (2004-2020). Titular COAED (actual Coordinadora); CCA PEDECIBA-Química (suplente); Coordinadora subárea-fisicoquímica y Comisión ingresos. Coordinadora (2009-2019) Maestría Bioinformática (UdelaR-PEDECIBA) 2019- Titular Química/Maestría-Bioinformática. Articulación y colaboraciones para el desarrollo de soluciones durante la pandemia de COVID-19.

Gestión.

2019-2021 Dirección DETEMA durante la cual se desea destacar la realización del Proceso de Autoevaluación Institucional del departamento y el desarrollo e instalación de la página web DETEMA.

Eventos que hemos tenido el honor de organizar y presidir en Uruguay: Sociedad Iberoamericana de Bioinformática SoiBio 2019 y Congreso de Químicos Teóricos de expresión Latina QUITEL2023, con la participacines de investigadores de la Bioinformática y las Ciencias Químicas-Biológicas?Bioquímicas Computacionales, agrupado a mas de 120 participantes de España, Portugal, Francia, Canadá, Brasil, Argentina, Ecuador, Colombia, Perú, México, Chile, Bélgica, Reino Unido y Uruguay y con un promedio de 150 ponencias.

Basado en todo lo informado, solicitamos considerar la permanencia y promoción al Nivel III en el Sistema Nacional de Investigadores.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Pouring SIRAH on NAMD (Completo, 2024)

J. CANTERO , AC. BALLESTEROS , L. SANTOS , M. PAULINO , S. PANTANO

Journal of Physical Chemistry B, 2024

Palabras clave: SYRAH Coarse grain NAMD

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformatica Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 10895647

E-ISSN: 15205207

<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpbc.4c03278>

WEB OF SCIENCE™

New Smoothened ligands based on the purine scaffold as potential agents for treating pancreatic cancer (Completo, 2024)

C ESPINOSA , J BERTRAND , A. VILLEGAS-MENARES , S. GUERRERO , L. DI MARCOTULLIO , SH. NAVACCI , G. SCHULTE , P. KOZIELEWICZ , N. BLOCH , V. VILLELA , M. PAULINO , M. KOGAN , J. CANTERO , C.O. SALAS

Bioorganic Chemistry, v.: 151 p.:10768 2024

Palabras clave: purine pancreatic cancer in silico bioinformatic medicinal chemistry

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Bioinformática estructural / Medicina Química

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00452068

E-ISSN: 10902120

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2024.107681>
<https://www.sciencedirect.com/journal/bioorganic-chemistry>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Antifungal and Antiparasitic Activity of Novel Metallocene-containing Fluconazole Derivatives (Completo, 2024)

L Yan, G. Scalese, C. Bulman, R. Vinck, O. Blacque, M. PAULINO, A. Ballesteros-Gasallas, L. Pérez Díaz, G. Salinas, M. Mitreva, T. Weil, K. Cariou, J. Sakanari, D. Gambino, G. Gasser
ACS Infectious Diseases, 2024

Palabras clave: Novel Metallocene-containing Fluconazole Derivatives Antifungal and Antiparasitic Activity

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática - Medicina Química

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 23738227

DOI: <http://dx.doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-cp31b>

<https://pubs.acs.org/journal/aidcbc>

WEB OF SCIENCE™ Scopus® 

Prenylated flavonoids from Dalea genus as xanthine oxidase inhibitors: In vitro bioactivity evaluation and molecular docking studies (Completo, 2023)

M.D. SANTI, E. BEDOYA AGUIRRE, M.F. NEGRO, M. PAULINO ZUNINI, M.A. PERALTA, M.G. ORTEGA

Results in Chemistry, v.: 6 p.:101115 2023

Palabras clave: prenylated flavonoids docking xanthine oxidase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Productos naturales y Bioinformática

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 22117156

DOI: [10.1016/j.rechem.2023.101115](https://doi.org/10.1016/j.rechem.2023.101115)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.rechem.2023.101115>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Identification of potential biological target for trypanocidal sesquiterpene lactones derivatives (Completo, 2023)

T ADESSI, J CANTERO, AC BALLESTEROS, ME GARCÍA, V NICOTRA, M. PAULINO

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 1 p.:1 - 14, 2023

Palabras clave: Lactonas sesquiterpénicas tripanosomatideos tripanotiona reductasa anclaje reverso

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 15380254

DOI: <https://doi.org/10.1080/07391102.2023.2183031>

<https://www.tandfonline.com/loi/tbsd20>

Mode of action of p-quinone derivatives with trypanocidal activity studied by experimental and in silico models (Completo, 2023) Trabajo relevante

ANDRES BALLESTEROS-CASALLAS, CRISTINA QUIROGA, CECILIA ORTIZ, DIEGO BENÍTEZ, PABLO A. DENIS, DAVID FIGUEROA, CRISTIAN O. SALAS, JEANLUC BERTRAND, RICARDO A. TAPIA, PATRICIO SÁNCHEZ, GIAN PIETRO MISCIONE, MARCELO A. COMINI, MARGOT PAULINO

European Journal of Medicinal Chemistry, v.: 246 p.:114926 2023

Palabras clave: tripanosomatideos quinonas metabolismo redox bioinformatica estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Medicina Química

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Netherlands

E-ISSN: 02235234

DOI: [10.1016/j.ejmech.2022.114926](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2022.114926)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.ejmech.2022.114926>

Scopus[®]

Identification of tyrosine nitration as a nitroxidative postranslational modification in fibrinogen (Completo, 2023)

ROMINA MEDEIROS FIGUEREDO , ELIZABETH LÓPEZ-ACHIGAR , JORGE CANTERO PIÑANEZ , MARGOT PAULINO ZUNINI , ESPERANZA MORATO LÓPEZ , CARLOS GARCÍA GARCÍA , ANTONIO MARTINEZ RUIZ

Free Radical Biology and Medicine, v.: 201 p.:63 - 64, 2023

Palabras clave: tyrosine nitration nitroxidative postranslational modified fibrinogen

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Ciencias de la Salud / Ciencias de la Salud /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Netherlands

ISSN: 08915849

E-ISSN: 18734596

DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2023.03.258](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2023.03.258)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2023.03.258>

Esta investigación es multidisciplinaria y constituye parte de la Tesis Doctoral de Romina Medeiros

WEB OF SCIENCE[™] Scopus[®]

Antioxidant Capacity and NF- κ B-Mediated Anti-inflammatory Activity of Six Red Uruguayan Grape Pomaces (Completo, 2023) Trabajo relevante

E. FARIÑA , H. DAGHERO , M. BOLLATI-FOGOLIN , J. CANTERO , E. BOIDO , M. MONCADA-BASUALTO , F. POLTICELLI , M. PAULINO

Molecules, v.: 28 2023

Palabras clave: grape pomace molecular docking ABTS DPPH ORAC FRAP ESR antioxidant antiinflammatory phenols NF- κ B

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Productos Naturales -
Compuestos Bioactivos - Bioinformatica Estructural

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 14203049

DOI: <https://doi.org/10.3390/xxxxx>

www.mdpi.com/journal/molecules

Scopus[®]

Platinum and Palladium Compounds: Disrupting the Ergosterol Pathway in Trypanosoma cruzi (Completo, 2023)

F. MOSQUILLO , G. SCALESE , R. MOREIRA , P. DENIS , I. MACHADO , M. PAULINO , D. GAMBINO , L. PÉREZ

ChemBioChem, 2023

Palabras clave: trypanosoma cruzi platinum palladium molecular docking ergosterol biosynthesis pathway

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Medicina Química

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 14394227

E-ISSN: 14397633

DOI: <https://doi.org/10.1002/cbic.202300406>

<https://chemistry-europe.onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cbic.202300406>

Scopus[®]

Structure-Based Bioisosterism Design, Synthesis, Biological Evaluation and In Silico Studies of Benzamide Analogs as Potential Anthelmintics (Completo, 2022)

F. VAIOLETTI , M. PAULINO , G. MAHLER , SALINAS G , CECILIA SAIZ

Molecules, v.: 27 p.:2659 - 2678, 2022

Palabras clave: bioisosterism nematicide ortho-substitued benzamide C. elegans E. granulosus

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Síntesis, Bioinformática,

Medicina Química
Medio de divulgación: Internet
E-ISSN: 14203049
<https://www.mdpi.com/journal/molecules>
Scopus'

Modelling of the Citrus CCD4 family members: in silico analysis of membrane binding and substrate preference (Completo, 2022)

J. CANTERO , F. POLITICELLI , M. PAULINO
International Journal of Molecular Sciences, 2022
Palabras clave: CCD mandarinas carotenoides bioinformática
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Bioinformática
Medio de divulgación: Internet
E-ISSN: 14220067
<https://www.mdpi.com/journal/ijms>
Scopus'

Characterization of the B-cell epitopes of Echinococcus granulosus histones H4 and H2A recognized by sera from patients with liver cysts (Completo, 2022)

M. MAGLIOCO , F. AGÜERO , MP. VALACCO , A JUAREZ VALDEZ , M. PAULINO , AG FUCHS
Frontiers in Cellular and Infection Microbiology, 2022
Palabras clave: histones epitopes cell extract extracellular echinococcus granulosus
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Internet
E-ISSN: 22352988
<https://www.frontiersin.org/journals/cellular-and-infection-microbiology/sections/parasite-and-host#>
Scopus'

Modeling, molecular dynamics and docking studies of a full-length Echinococcus granulosus 2DBD nuclear receptor (Completo, 2022)

SAIRA CANCELA , ADRIANA ESTEVES , GABRIELA ALVITE , MARGOT PAULINO
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, p.:1 - 10, 2022
Palabras clave: 2DBD NUCLEAR RECEPTOR ECHINOCOCCUS GRANULOSUS STRUCTURAL BIOINFORMATICS
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: United kingdom
ISSN: 07391102
E-ISSN: 15380254
DOI: [10.1080/07391102.2021.2023641](https://doi.org/10.1080/07391102.2021.2023641)
<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2021.2023641>
Scopus'

Development of 3D-QSAR and pharmacophoric models to design new anti-Trypanosoma cruzi agents based on 2-aryloxynaphthoquinone scaffold (Completo, 2022)

M. PAULINO , C. ESPINOSA-BUSTOS , J. BERTRAND , D. CABEZAS , J. MELLA , B. DAVILA , H. CERECETTO , A. BALLESTEROS-GASALLA , C.O. SALAS
SAR and QSAR in Environmental Research, v.: 33 9 , p.:701 - 728, 2022
Palabras clave: quinones trypanosome
Areas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Ciencias de la Salud / Medicina Tropical / Bioinformática
Medio de divulgación: Otros
ISSN: 1062936X
E-ISSN: 1029046X
DOI: [10.1080/1062936X.2022.2120069](https://doi.org/10.1080/1062936X.2022.2120069)
<https://www.tandfonline.com/action/showCitFormats?>

Peptides derived from the gastrointestinal digestion of amaranth 11S globulin: structure and antioxidant functionality (Completo, 2021)

S. GARCIA FILLERIA, A. NARDO, M. PAULINO, V. TIRON

Food Chemistry Molecular Sciences, 2021

Palabras clave: péptidos bioactivos amaranto in silico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Bioinformática

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 26665662

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fochms.2021.100053>

<https://www.sciencedirect.com/journal/food-chemistry-molecular-sciences>

Synthesis of 2, 7-diarylpyrazolo [1, 5-a] pyrimidine derivatives with antitumor activity. Theoretical identification of targets (Completo, 2021)

Ballesteros-Casallas Andres, M. PAULINO, P VIDOSSICH, C MELO, E JIMÉNEZ, JC CASTILLO, J PORTILLO, GP MISCIONE

International Journal of Molecular Sciences, v.: 22 24, p.:13616 2021

Palabras clave: Colorectal carcinoma 4-Chlorophenyl 4-Methoxyphenyl Pyrazolo [1 5-a] pyrimidine

Reverse virtual screening

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / BIOINFORMÁTICA

ESTRUCTURAL

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 14220067

<https://www.mdpi.com/journal/ijms>

Scopus®

Expanding the chemical space of aryloxy-naphthoquinones as potential anti-Chagasic agents: synthesis and trypanosomicidal activity (Completo, 2021)

NOHEMÍA A. BECERRA, CHRISTIAN ESPINOSA-BUSTOS, KARINA VÁZQUEZ, GILDARDO RIVERA, MARGOT PAULINO, JORGE CANTERO, BENJAMÍN NOGUEDA, FABIOLA CHACÓN-VARGAS, UZIEL CASTILLO-VELAZQUEZ, ANA F. ELIZONDO RODRÍGUEZ, SOFÍA TOLEDO, ADRIANA MORENO-RODRÍGUEZ, MARIO ARANDA, CRISTIAN O. SALAS

Medicinal Chemistry Research, 2021

Palabras clave: quinonas anti-chagásicos anti-tripanosomatídeos farmacóforo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Bioinformática

Lugar de publicación: United states

ISSN: 10542523

E-ISSN: 15548120

DOI: [10.1007/s00044-021-02809-3](https://doi.org/10.1007/s00044-021-02809-3)

<http://dx.doi.org/10.1007/s00044-021-02809-3>

Scopus®

Convergent synthesis, drug target prediction, and docking studies of new 2,6,9-trisubstituted purine derivatives (Completo, 2021)

A. Villegas, R. Satheeshkumar, A. Ballesteros-Casallas, M. PAULINO, A. Castro, Ch. Espinosa-Bustos, C. SALAS

Journal of Heterocyclic Chemistry, p.:1 - 15, 2021

Palabras clave: purinas síntesis convergente docking drug target prediction

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática, Química

Orgánica

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 0022152X

E-ISSN: 19435193

DOI: [DOI: 10.1002/jhet.4368](https://doi.org/10.1002/jhet.4368)

wileyonlinelibrary.com/journal/jhet

Scopus®

Identification of pyrazolotriazinones as potential agents for hyperuricemia treatment by using in vitro and in silico studies (Completo, 2020)

ML Sciú , MD Santi , J Cantero , JP Colomer , M. PAULINO , MG Ortega , EL Moyano

SN Applied Sciences, v.: 143 p.:577 - 582, 2020

Palabras clave: pyrazolotriazinones hyperuricemia in silico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 25233963

E-ISSN: 25233971

DOI: [10.1007/s42452-020-2756-60](https://doi.org/10.1007/s42452-020-2756-60)

<https://www.springer.com/journal/42452>

New mechanistic insights into the reversible aldol reaction catalysed by Rhamnulose-1-phosphate aldolase from Escherichia coli (Completo, 2020)

A. Rigual , J. Cantero , M. Risso , P. Rodriguez , RODRÍGUEZ, S. , M. PAULINO , GAMENARA, D. , VEIGA, N.

Molecular Catalysis, v.: 495 p.:111 - 131, 2020

Palabras clave: DHAP-dependent aldolases Rhamnulose-1-phosphate aldolase Escherichia coli

Computational analysis Catalytic mechanism

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Biocatálisis - Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 24688231

DOI: [10.1016/j.mcat.2020.111131](https://doi.org/10.1016/j.mcat.2020.111131)

www.elsevier.com/locate/mcat

Scopus

A New Approach to analyze Rotavirus Transport Mechanism in Porous Media by Molecular Modelling and Molecular Dynamics methods. Albany 2019 Conversation 20 June 11-15 2019 Adenine Press (2019) (Resumen, 2019)

E. ALVAREDA , J. CANTERO , F LOPEZ TORT , M VICTORIA , M. PAULINO , R COLINA , P GAMAZO

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2019

Palabras clave: Rotavirus Molecular Dynamics Molecular Modelling

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias Biológicas / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

<https://www.jbsdonline.com/c4330/c4332/a-new-approach-analyze-rotavirus-transport-mechanism-porous-m>

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Bioinformatic analysis of a novel Echinococcus granulosus nuclear receptor with two DNA binding domains (Completo, 2019)

G. ALVITE , X. RIERA , S. CANCELA , M. PAULINO ZUNINI , ESTEVES, A

PLoS ONE, p.:1 - 16, 2019

Palabras clave: Echinococcus granulosus nuclear receptor

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Métodos de Investigación en Bioquímica /

Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 19326203

DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0224703>

<https://journals.plos.org/plosone/s/journal-information>

WEB OF SCIENCE™ Scopus

New aryloxy?quinone derivatives with promising activity on Trypanosoma cruzi (Completo, 2019)

CH. ESPINOSA, K. VAZQUEZ, J. VARELA, CERECETTO, H., M. PAULINO ZUNINI, R. SEGURA, B. VERA, J. PIZARRO, GONZALEZ, M., AM. ZARATE, C. SALASQui

Archiv der Pharmazie, v.: 353 1, p.:1 - 11, 2019

Palabras clave: Quinonas Tripanosomicidas Farmacóforo electrochemical studies Structure Activity Relationship

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 03656233

E-ISSN: 15214184

DOI: [10.1002/ardp.201900213](https://doi.org/10.1002/ardp.201900213)

nelibrary.wiley.com/journal/15214184

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

In Silico and in Vitro Approach for the Understanding of the Xanthine Oxidase Inhibitory Activity of Uruguayan Tannat Grape Pomace and Propolis Polyphenols (Completo, 2019)

Elena Alvareda Migliaro, Federico Iribarne, Victoria Espinosa, Pablo Miranda, Maria Daniela santi, Sara Aguilera, Sandra Bustos, M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biophysical Chemistry, v.: 10 1, p.:1 - 14, 2019

Palabras clave: phenols xanthine oxidase grape pomace tannat propolis functional foods

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2153036

DOI: [10.4236/jbpc.2019.101001](https://doi.org/10.4236/jbpc.2019.101001)

The use of food additives with xanthine oxidase (XO) inhibitory activity offers an alternative approach to hyperuricemic and gout disease treatment, and provides an example of antioxidant nutraceuticals. The in vitro and in silico XO inhibitory activity of polyphenols from Uruguayan Tannat grape pomaces and propolis extracts was evaluated as well as the scavenging capacity of said compounds. When comparing propolis and grape pomace samples, the in vitro studies demonstrated that polyphenols extracted from propolis are more active as free radical scavengers than those from Tannat grape pomace. Both natural products effectively inhibited XO but the capacity of phenols present in GP is higher than the one present in P. The high content of anthocyanins in GP, absent in P, could account for this observation. In silico assays allowed us to determine relevant ligand-receptor interactions between polyphenols, from a database built with previously reported polyphenols from both natural products, and the active site of XO. The in silico results showed that compound (E)-isoprenylcaffeate from propolis was the best potential XO inhibitor displaying hydrophobic aromatic interaction between the conjugated ring of the caffeate moiety and polar interactions between hydroxyl groups from caffeate with the active site polar residues. Among grape pomaces, the Cyanidin-3-O-(6-(E)-p-coumaroyl)-glucoside was the best XO inhibitor; its moiety oxochromenyl being relevant to the docking stabilization. All these results lead us to propose Uruguayan propolis and Tannat grape pomace extracts as food additives as well as phytopharmaceuticals to decrease the uric acid levels in gout disease and to act against oxidative stress.

An in silico study of the citrus dioxygenases CCD4 family substrates (Completo, 2018) Trabajo relevante

Mauricio Vega Tejjido, Jorge Cantero, Maria Jesus Rodriguez, Carolina López, M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 5 p.:1 - 12, 2018

Palabras clave: carotenoids CCD4 citrus cyclooxygenases

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Albany NY

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

DOI: [10.1080/07391102.2018.1477619](https://doi.org/10.1080/07391102.2018.1477619)

www.jbsdonline.com

The coloration of Citrus fruits is related with the concentration of carotenoids, isoprenoid pigments of 40 carbon atoms (C40). Rodrigo et al. and Ma et al. reported a CCD4-type citrus dioxygenase responsible for the generation of C30 apocarotenoids providing a reddish-orange pigmentation to the peel of many man- darins and oranges. Among them, CCD4b was the first case described of a dioxygenase that cleaves caro- tenoids C40 in the double bond 70, 80 or 7, 8, generating b-

citraurin or 8-b-apocarotenal. Here we report the three-dimensional structures of CCD4a and CCD4b, modeled by sequence homology (2BIW) and validated by molecular dynamics (MD). Docking calculations were performed in CCD4a and CCD4b structures with thousands of rotated initial carotenoid conformations and all the possible poses in the active site were found. The interaction energy was measured by means of ASE scoring, Amber99 refinement and London DG rescoring. For the case of CCD4a model, the results showed London DG score of 19, 17 and 15 kcal/mol for zeaxanthin, b-cryptoxanthin and b-carotene, respectively. The same sequence in the estimated interaction strength for the three ligands was obtained using MD. The interaction energy of CCD4b indicated that, in agreement with experimental data, zeaxanthin and b-cryptoxanthin could be cleaved by the enzyme, b- and a-carotene have chances to be oxidized and lycopene has not good interaction energy to be predicted as substrate. These findings will be discussed considering the potential in vivo substrates and products, and the physiological role in Citrus fruits.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Xanthine oxidase inhibitory activity of natural and hemisynthetic flavonoids from *Gardenia oudiepe* (rubiaceae) in vitro and molecular docking studies (Completo, 2018)

MD SANTI, M. PAULINO ZUNINI, B VERA, C Bousidi, V Dumontet, A Abin-Carriquiry, R Grougnet, MG ORtega
Chimie Thérapeutique, v.: 143 p.:577 - 582, 2018
Palabras clave: xanthine oxidase phenols antioxidants molecular docking
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00094374
DOI: [10.1016/j.ejmech.2017.11.071](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.11.071)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Structural Analysis and Molecular Docking of Trypanocidal Aryloxy-quinones in Trypanothione and Glutathione Reductases: A Comparison with Biochemical Data (Completo, 2017)

B VERA, K. VAZQUEZ, C. MASCAYANO, R. TAPIA, V. ESPINOSA, J SOTO-DELGADO, C.O. SALAS, M. PAULINO ZUNINI
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 35 8, p.:1785 - 1803, 2017
Palabras clave: tripanotiona reductasa quinonas tripanosomicidas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 07391102
E-ISSN: 15380254
DOI: [10.1080/07391102.2016.1195283](https://doi.org/10.1080/07391102.2016.1195283)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Trypanothione Reductase: A Target for the Development of Anti-Trypanosoma cruzi drugs (Completo, 2017)

K. VAZQUEZ, M. PAULINO ZUNINI, C.O. SALAS, ZáRATE JJ, B VERA, RIVERA G
Mini-Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 17 2017
Palabras clave: quinonas chagas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 13895575
DOI: [10.2174/1389557517666170315145410](https://doi.org/10.2174/1389557517666170315145410)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Structural evidence of quercetin multi-target bioactivity: a reverse virtual screening strategy (Completo, 2017) Trabajo relevante

D CARVALHO, M. PAULINO ZUNINI, POLTICELLI F, WILLIAMS R, ABIN JA
European Journal of Pharmaceutical Sciences, v.: 106 p.:393 - 403, 2017
Palabras clave: quercetina Anclaje reverso nuevas dianas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09280987
DOI: [10.1016/j.ejps.2017.06.028](https://doi.org/10.1016/j.ejps.2017.06.028)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Combined Molecular Modelling and 3D-QSAR Study for Understanding the Inhibition of NQO1 by Heterocyclic Quinone Derivatives (Completo, 2017)

LÓPEZ C , ALZATE J , M. PAULINO ZUNINI , MELLA J , C.O. SALAS , R. TAPIA , J SOTO
Chemical Biology & Drug Design, v.: 91 1 , p.:29 - 38, 2017
Palabras clave: quinonas cancer NQO1
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software
Medio de divulgación: Papel
E-ISSN: 17470285
DOI: [10.1111/cbdd.13051](https://doi.org/10.1111/cbdd.13051)
WEB OF SCIENCE™

Bond dissociation energies and enthalpies of formation of flavonoids: a G4 and M06-2X investigation (Completo, 2016)

ALVAREDA E , DENIS P , IRIBARNE F , M. PAULINO ZUNINI
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1091 p.:18 - 23, 2016
Palabras clave: flavonoids Bond dissociation G4 M06-2X
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 2210271X
E-ISSN: 22102728
DOI: [10.1016/j.comptc.2016.06.021](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2016.06.021)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Unleashing the graphic processing units-based version of NAMD (Completo, 2016)

GONZÁLEZ Y , EZZATTI O , M. PAULINO ZUNINI
Bioinformatics and Biology Insights, v.: 9656 p.:639 - 650, 2016
Palabras clave: NAMD GPU APOA1
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software
Medio de divulgación: Papel
E-ISSN: 11779322
DOI: [10.1007/978-3-319-31744-1_56](https://doi.org/10.1007/978-3-319-31744-1_56)
Scopus®

Identification of novel CAP superfamily protein members of Echinococcus granulosus protoscoleces (Completo, 2016)

M C SALAVERRY , A COSTÁBILE , S ECHAVERRIA , ESTELA CASTILLO , M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES
Acta Tropica, v.: 158 p.:59 - 67, 2016
Palabras clave: Echinococcus granulosus
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 0001706X
DOI: [10.1016/j.actatropica.2016.02.011](https://doi.org/10.1016/j.actatropica.2016.02.011)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Towards the understanding of the molecular basis for the inhibition of COX-1 and COX-2 by phenolic compounds present in Uruguayan propolis and grape pomace (Completo, 2016)

M. PAULINO ZUNINI , E. ALVAREDA , F. IRIBARNE , P. MIRANDA , V. ESPINOSA , S. AGUILERA-MORALES , H. PARDO

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 34 12 , p.:2643 - 2657, 2016
Palabras clave: propolis ciclooxygenase antiinflammatory effect phenols flavonoids grape pomace
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Desarrollo de compuestos bioactivos
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 07391102
E-ISSN: 15380254
DOI: [10.1080/07391102.2015.1124808](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1124808)
<http://www.jbsdonline.com/jbsd-taken-over-taylor-and-francis-c4319.html>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

PROVITIS: Un consorcio entre la Ciencia y la Producción (Completo, 2015)

M. PAULINO ZUNINI
Voces, v.: 464 2015
Palabras clave: propolis orujos de uvas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Desarrollo de compuestos bioactivos
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Montevideo
Escrito por invitación
ISSN: 11303336
E-ISSN: 24447064
[latindex](#)

A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants (Completo, 2015)

M VEGA TEIJIDO , M. PAULINO ZUNINI , C. LOPEZ , M.J. RODRIGO
Revista Processos Químicos, v.: 9 18 , p.:163 - 163, 2015
Palabras clave: carotenoids citrus dioxygenase
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Goiania - Brazil
E-ISSN: 19818521
www.rpqsenai.org.br

New aryloxy-quinone derivatives as potential Anti-Chagasic agents: Synthesis, trypanosomicidal activity, electrochemical properties, pharmacophore elucidation and 3D-QSAR analysis (Completo, 2015)

K. VAZQUEZ , CH ESPINOSA-BUSTOS , J SOTO-DELGADO , RA TAPIA , J. VARELA , E BIRRIEL , RODRIGO SEGURA , JAIME PIZARRO , H. CERECETTO , M GONZALEZ , M. PAULINO ZUNINI , CO SALAS
RSC Advances, 2015
Palabras clave: chagas quinones
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Medicina Química
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel
E-ISSN: 20462069
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Antiinflammatory activity of phenolic compounds extracted from Uruguayan propolis and grape (Completo, 2015)

E. ALVAREDA , P. MIRANDA , V. ESPINOSA , H. PARDO , S. AGUILERA-MORALES , M. PAULINO ZUNINI
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 33 1 , p.:129 - 129, 2015
Palabras clave: propolis phenols flavonoids grape pomace antiinflammatory

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

DOI: [10.1080/07391102.2015.1032833](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1032833)

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2015.1032833>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Synthesis and pharmacophore modelling of 2,6,9-trisubstituted purine derivatives and their potential role as apoptosis-inducing agents in cancer cell lines (Completo, 2015)

CH ESPINOSA-BUSTOS, J CALDERÓN, A CAÑETE, RA TAPIA, M FAUNDEZ, MJ TORRES, A AGUIRRE, M. PAULINO ZUNINI, CO SALAS

Molecules, v.: 20 4, p.:6808 - 6826, 2015

Palabras clave: purine apoptosis pharmacophore

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 14203049

DOI: [10.3390/molecules20046808](https://doi.org/10.3390/molecules20046808)

http://www.mdpi.com/journal/molecules/sections/medicinal_chemistry

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Analysis of Cyclosporin A and a Set of Analogues as Inhibitors of a T. cruzi Cyclophilin by Docking and Molecular Dynamics (Completo, 2015)

R. CARRARO, F. IRIBARNE, M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2015

Palabras clave: molecular dynamics cyclophilin chagas linear interaction energy (LIE)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Guilderland, NY, USA

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

DOI: [10.1080/07391102.2015.1038584](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1038584)

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2015.1038584>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents (Completo, 2014)

R. TAPIA, C.O. SALAS, K. VAZQUEZ, CH ESPINOSA-BUSTOS, J SOTO-DELGADO, J. VARELA, E BIRRIEL, H. CERECETTO, M GONZALEZ, M. PAULINO ZUNINI

Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 24 16, p.:3919 - 3922, 2014

Palabras clave: chagas indolquinonas farmacóforo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 0960894X

Ms. Ref. No.: BMCL-D-14-00714R1 Title: Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters Dear Dr Tapia, I am pleased to notify you that your manuscript "Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents" has been accepted for publication in Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. When your paper is published on ScienceDirect, you want to make sure it gets the attention it deserves. To help you get your message across, Elsevier has developed a new, free service called AudioSlides: brief, webcast-style presentations that are shown (publicly available) next to your published article. This format gives you the opportunity to explain your research in your own words and attract interest. You will receive an invitation email to create an AudioSlides presentation shortly. For more information and examples, please visit <http://www.elsevier.com/audioslides>. Thank you for submitting your work to Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. With kind regards, Dale L. Boger, Ph.D. Editor-in-Chief Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters

Towards an Understanding of Mesocestoides vogae Fatty Acid Binding Proteins Roles (Completo, 2014)

G. ALVITE , N GARRIDO , A KUN , M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES

PLoS ONE, v.: 9 10 e111204, p.:1 - 11, 2014

Palabras clave: FABPs Mecoscestoides Vogae

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de parásitos

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Canada

E-ISSN: 19326203

www.plosone.org

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

STUDY OF THE TIME-COURSE CIS/TRANS (Z/E) ISOMERISATION OF LYCOPENE, PHYTOENE AND PHYTOFLUENE FROM TOMATO. TECHNOLOGICAL AND NUTRITIONAL IMPLICATIONS (Completo, 2014)

A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ , M. PAULINO ZUNINI , C STINCO , P MAPELLI-BRAHM , X-D. WANG

Journal of Agricultural and Food Chemistry, v.: 62 p.:12399 - 12406, 2014

Palabras clave: carotenoides, bioinformatica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00218561

E-ISSN: 15205118

DOI: [10.1021/jf5041965](https://doi.org/10.1021/jf5041965)

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

In vitro and in silico analysis of the Aspergillus nidulans DNA-CreA repressor interactions (Completo, 2013)

P. ESPERÓN , C. SCAZZOCCHIO , M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 00 00 00, 2013

Palabras clave: Aspergillus nidulans Zinc finger DNA-protein interaction TGEK Linker

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformatica estructural, análisis conformacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: UK

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

DOI: [\[Epub ahead of print\] PMID: 24125468 \[PubMed - a](https://doi.org/10.1080/07391102.2013.828888)

<http://www.tandfonline.com/toc/tbsd20/current#.Ui4zvsYreul>

08-Sep-2013 Dear Dr Paulino: Ref: In vitro and in silico analysis of the Aspergillus nidulans DNA-CreA repressor interactions We are pleased to accept your paper in its current form which will now be forwarded to the publisher for copy editing and typesetting. You will receive proofs for checking, and instructions for transfer of copyright in due course. The publisher also requests that proofs are checked through the publishers tracking system and returned within 48 hours of receipt. Thank you for your contribution to Journal of Biomolecular Structure & Dynamics and we look forward to receiving further submissions from you. Sincerely, Professor Sarma Editor in Chief, Journal of Biomolecular Structure & Dynamics rhs07@albany.edu

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs (Completo, 2013)

A. ESTÉVES , M. PAULINO ZUNINI

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 31 2 , p.:224 - 239, 2013

Palabras clave: E granulosus, FABPs, bioinformatica estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

Flavonoides en Productos Naturales - Entrevista a Margot Paulino Zunini realizada por Javier Taks (Completo, 2011)

J. TAKS, M. PAULINO ZUNINI

Trama, v.: 3 p.:86 - 99, 2011

Palabras clave: antioxidantes marcela

Areas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Sociología / Antropología, Etnología / Antropología Social

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Montevideo

Escrito por invitación

ISSN: 16886348

E-ISSN: 16886356

latindex

Phenolic contents and antioxidant activity in central southern Uruguayan propolis extracts. (Completo, 2010)

M. PAULINO ZUNINI, C. ROJAS, S. DEPAULA, I. ELINGOLD, E. ALVAREDDA, M.B. CASANOVA, F. IRIBARNE, S. AGUILERA-MORALES, M. DUBIN

Journal of the Chilean Chemical Society, v.: 55 1, p.:141 - 146, 2010

Palabras clave: antioxidantes propolis

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Chile

E-ISSN: 07179707

WEB OF SCIENCE™ Scopus® Sciendo latindex

In silico characterization of cytisinoids docked into an Acetylcholine Binding Protein. (Completo, 2010) Trabajo relevante

A. ABIN-CARRIQUIRY, M. PAULINO ZUNINI, B. K. CASSELS, S. WONNACOTT, F. DAJAS

Bioorganic & Medicinal Chemistry, v.: 20 p.:3683 - 3687, 2010

Palabras clave: nicotínicos in silico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Amsterdam

ISSN: 09680896

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Assaying phenothiazine derivatives as trypanothione reductase and glutathione reductase inhibitors by theoretical docking and Molecular Dynamics studies (Completo, 2009)

F. IRIBARNE, M. PAULINO ZUNINI, S. AGUILERA-MORALES, O. TAPIA

Journal of Molecular Graphics and Modelling, v.: 28 p.:371 - 381, 2009

Palabras clave: Chaga's disease Phenothiazines trypanothione reductase binding affinity theoretical docking molecular dynamics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10933263

DOI: [10.1016/j.jmgm.2009.09.003](https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2009.09.003)

www.elsevier.com/locate/JMGM

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Studies of Tripanocidal (Inhibitory) Power of Naphthoquinones: Evaluation of Quantum Chemical Molecular Descriptors for Structure-activity Relationships (Completo, 2008)

M. PAULINO ZUNINI , E.M. ALVAREDA , P. A. DENIS , E. J. BARREIRO , G.M. SPERANDIO DA SILVA , M. DUBIN , C. GASTELLÚ , S. AGUILERA , O. TAPIA

European Journal of Medicinal Chemistry, v.: 43 10, p.:2238 - 2246, 2008

Palabras clave: trypanocides naphthoquinones

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 02235234

(Publicado on-line) EJMC3034. PMID: 18276039

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Interaction energies of nitrofurans with trypanothione reductase and glutathione reductase studied by molecular docking (Completo, 2007)

F. IRIBARNE , H. CERECETTO , M. GONZÁLES , S. AGUILERA , O. TAPIA , M. PAULINO ZUNINI

Journal of Molecular Structure THEOCHEM, v.: 818 p.:7 - 22, 2007

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Modelling and study of cyclosporin A and related compounds complexes with a Trypanosoma cruzi cyclophilin (Completo, 2007)

R. CARRARO , J. BÚA , A. RUIZ , M. PAULINO ZUNINI

Journal of Molecular Graphics and Modelling, v.: 26 p.:48 - 61, 2007

Palabras clave: Trypanosoma cruzi ciclofilina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10933263

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

The chemotherapy of Chaga's disease: An overview (Completo, 2005)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. DUBIN , S. AGUILERA-MORALES , O. TAPIA , A.O.M. STOPPANI

Mini-Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 5 p.:173 - 183, 2005

Palabras clave: chagas quimioterapia del chagas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 13895575

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Docking and molecular dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites (Completo, 2002)

F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI , S. AGUILERA , M. MURPHY , O. TAPIA

Journal of Molecular Modeling, v.: 5 p.:173 - 183, 2002

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 09485023

. F. Iribarne, M. Paulino, S. Aguilera, M. Murphy, O. Tapia, J. Mol. Mod., (2002), 5:173-183.

Computer assisted design of potentially active anti-trypanosomal compounds. (Completo, 2002)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. HANSZ , N. HIKICHI , M. VEGA , G. SEOANE , H. CERECETTO , R. DI MAIO , I. CARACELLI , I. ZUKERMAN-SCHPECTOR , C. OLEA-AZAR , P. MIRANDA , M. BERRIMAN , A.H. FAIRLAMB , O. TAPIA
Journal of Molecular Structure, v.: 584 p.:95 - 105, 2002

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 00222860

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Modelling CreA protein-DNA recognition determinants. A molecular dynamics study of fully charged CreA-DNA model in water. (Completo, 2002)

M. PAULINO ZUNINI , M. VEGA , P. ESPERÓN , C. SCAZZOCCHIO , O. TAPIA
Journal of Molecular Structure THEOCHEM, v.: 584 p.:225 - 242, 2002

Palabras clave: Aspergillus nidulans CreA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

M. Paulino, M. Vega, P. Esperón, C. Scazzocchio and O. Tapia J. Mol. Struct. (TEOCHEM), (2002), 584:

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Relaxation dynamics of biopolymers seeded with unfolded lysozyme transients in vacuo. The role of primary sequence in protein folding (Completo, 2001)

G. A. ARTECA , M. PAULINO ZUNINI , C.T. REINMANN , O. TAPIA
Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 2 p.:5259 - 5267, 2001

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14639076

E-ISSN: 14639084

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Hydride Transfer Transition Structure as an Unifying Redox Step for Describing the Branched Kinetics of Glutathione Reductase. Molecular-Electronic Antecedents. (Completo, 2000)

F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA
Theoretical Chemistry Accounts, v.: 103 p.:451 - 462, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

ISSN: 1432881X

E-ISSN: 14322234

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Recognition determinants in T4«G4 mutant derived from a (5« GCGTGGGCGT-«4) oligomer in a Zif268-DNA complex. A molecular dynamics study of the fully charged complex in water. (Completo, 2000)

G. ROXSTROM , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA
Theoretical Chemistry Accounts, v.: 104 p.:96 - 108, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

ISSN: 1432881X

E-ISSN: 14322234

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Cytotoxicity of lipophilic o-naphthoquinones: structure-activity relationships (Completo, 2000)

A.O.M. STOPPANI , S. GOIJMAN , M. DUBIN , S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL , M.P. MOLINA
PORTELA , A.M. BISCARDI , M. PAULINO ZUNINI

Comparative Biochemistry and Physiology Part C Toxicology & Pharmacology, v.: 7 p.:1 - 16, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado Molecular

ISSN: 15320456

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Molecular cloning, sequencing and expression of a serine proteinase inhibitor gene from *Toxoplasma gondii*. (Completo, 2000)

V. PSZENNY , S.O. ANGEL , M. PAULINO ZUNINI , B. LEDESMA , E. GUARNERA , A.M. RUIZ , E.
BONTEMPI

Molecular and Biochemical Parasitology, v.: 107 p.:241 - 249, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01666851

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Synthesis and anti-trypanosomal evaluation of E-isomers of 5-nitro-2 furaldehyde and 5-nitrothiophene-2- carboxaldehyde semicarbazone derivatives. Structure-activity relationships. (Completo, 2000)

H. CERECETTO , R. DI MAIO , M. GONZALEZ , M. RISSO , G. SAGRERA , G. SEOANE , A.
DENICOLA , G. PELUFFO , C. QUIJANO , A. O. M. STOPPANI , M. PAULINO ZUNINI , C. OLEA-
AZAR , M. A. BASOMBRÍO

European Journal of Medicinal Chemistry, v.: 35 p.:343 - 350, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 02235234

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Molecular Dynamics Simulation of a Zif268-DNA Complex in Water. Spatial Patterns and Fluctuations Sensed from a Nanosecond Trajectory. G (Completo, 1998)

G. ROXTROM , I. VELÁZQUEZ , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

The Journal of Chemical Physics, v.: 102 p.:1828 - 1832, 1998

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado Molecular

ISSN: 00219606

E-ISSN: 10897690

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

DNA Structure and Fluctuations Sensed from a 1.1ns Molecular Dynamics TRajjectory of a Fully Charged Zif268-DNA Complex in Water. G (Completo, 1998)

G. ROXTROM , I. VELÁZQUEZ , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 2 p.:301 - 302, 1998

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07391102

E-ISSN: 15380254

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Synthesis and Anti-Trypanosomal Activity of Novel 5-Nitro-2-furaldehyde and 5-Nitrothiophene-2-

carboxaldehyde Semicarbazones Derivatives (Completo, 1998)

H. CERECETTO, R. DI MAIO, G. IBARRURI, G. SEOANE, A. DENICOLA, C. QUIJANO, C. PELUFFO, M. PAULINO ZUNINI

Il Farmaco, v.: 53 p.:84 - 94, 1998

Palabras clave: chagas anti tripanosoma semicarbazonas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Francia

ISSN: 0014827X

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Modelling a 3D Structure for EgDf1 from Echinococcus granulosus. Putative epitopes, phosphorylation motifs and ligand. (Completo, 1998) Trabajo relevante

M. PAULINO ZUNINI, A. ESTEVES, M. VEGA, G. TABARES, R. EHRLICH, O. TAPIA

Journal of Computer-Aided Molecular Design, v.: 12 p.:351 - 360, 1998

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 0920654X

E-ISSN: 15734951

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Remarks on the Phylogeny and Structure of Fatty Acid Binding Proteins from Parasitic Platyhelminths (Completo, 1997)

A. ESTEVES, M. PAULINO ZUNINI, L. JOSEPH, R. EHRLICH

International Journal for Parasitology, v.: 27 p.:1013 - 1023, 1997

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207519

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

A new analogue of Nifurtimox (Completo, 1996)

I. CARACELLI, F.M.L.G. STAMATO, B. MESTER, M. PAULINO ZUNINI, H. CERECETTO

Acta Crystallographica Section C Crystal Structure Communications, v.: 52 p.:1281 - 1282, 1996

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01082701

E-ISSN: 16005759

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Transition structure and reactive complexes for hydride transfer in an isoalloxazine-nicotinamide complex. On the catalytic mechanism of a glutathione reductase. An ab initio MO SCF study. (Completo, 1996)

W. DIAZ, J.M. AULLO, M. PAULINO ZUNINI, O. TAPIA

The Journal of Chemical Physics, v.: 204 p.:195 - 203, 1996

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

ISSN: 00219606

E-ISSN: 10897690

WEB OF SCIENCE™ Scopus®


Oxygen radicals and the chemotherapy of Chagas's disease: an overview (Completo, 1996)

A.O.M. STOPPANI, M. PAULINO ZUNINI, M. DUBIN

Ciência e Cultura, v.: 48 1 2, p.:75 - 86, 1996

Palabras clave: free radicals chaga's disease


Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel
E-ISSN: 00096725
http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?script=sci_serial&lng=en&pid=0009-6725&nrm=iso


Computer assisted simulations and molecular graphics methods in molecular design. 2. Proteinases and Receptor and Transport Proteins. (Completo, 1995)

M. PAULINO ZUNINI , F.M.L.G. STAMATO , R. GARRAT , C.M. SOARES
Molecular Engineering, v.: 4 p.:375 - 414, 1995
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09255125
E-ISSN: 15728951

A Molecular Dynamic Study of Structure of glutathione reductase. (Completo, 1995)

N. HIKICHI , M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , O. TAPIA
Journal of Molecular Structure, v.: 335 p.:243 - 254, 1995
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
E-ISSN: 00222860


Computer assisted simulations and molecular graphics methods in molecular design. Theory and applications to enzyme active-site-directed drug design. (Completo, 1994)

O. TAPIA , M. PAULINO ZUNINI , F.M.L.G. STAMATO
Molecular Engineering, v.: 3 p.:377 - 414, 1994
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09255125
E-ISSN: 15728951

A computer Model Built Structure of the T. Congolense Trypanothione Reductase in Complex with NADP (Completo, 1992)

E. HORJALES , B. OLIVA , F.M.L.G. STAMATO , M. PAULINO ZUNINI , O. NILSSON
Molecular Engineering, v.: 1 p.:357 - 375, 1992
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09255125
E-ISSN: 15728951

Propiedades Electrónicas y actividad redox de naftoquinonas (Completo, 1992)

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , G. TABARES , MP MOLINA PORTELA , S.H. FERNANDEZ-VILLAMIL , C SREIDER , AOM STOPPANI
Anales de la Sociedad Científica Argentina, v.: 82 5, p.:379 - 389, 1992
Palabras clave: naftoquinonas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Buenos Aires Argentina

ISSN: 00378437

3.1.31 M. Hansz; N. Hikichi; G. Tabares; M.P.Molina Portela; S.H.Fernandez Villamil; C.M. Sreider; A

 latindex

Electronic Properties and Free Radical Production by Nitrofurans Compounds. (Completo, 1992)

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , A.O.M. STOPPANI

Free Radical Research, v.: 16 p.:207 1992

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10715762

E-ISSN: 10292470

Novel approach to the study of the mode of action of new antichagasic chemicals (Completo, 1992)

M. PAULINO ZUNINI , F. STAMATO , A.O.M STOPPANI , O. TAPIA

Memórias do Instituto Oswaldo Cruz, v.: 87 II, p.:76 1992

Palabras clave: antichagasic mode of action

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Enfermedad de Chagas, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 00740276

 WEB OF SCIENCE™ Scopus'  latindex

Inhibition of Microsomal Lipid Peroxidation and Cytochrome P-450 Catalyzed Reactions by Nitrofurans Compounds (Completo, 1991)

M. DUBIN , S. FERNÁNDEZ , M. PAULINO ZUNINI , A.O.M. STOPPANI

Free Radical Research, v.: 14 p.:419 - 431, 1991

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10715762

E-ISSN: 10292470

Quantitative Structure Activity Relationships of 5-Nitrofurans Derivatives (Completo, 1990)

B. MESTER , N. HIKICHI , M. HANSZ , M. PAULINO ZUNINI

Chromatographia, v.: 30 p.:191 1990

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00095893

E-ISSN: 16121112

 WEB OF SCIENCE™ Scopus'

Acción del ketoconazol sobre un modelo experimental agudo de infección por Trypanosoma cruzi. (Completo, 1990)

E. CIVILA , R. SALVATELLA , R. MANCEBO , R. ROSA , Y. BASMADJIAN , G. MENDARO , M.

FERNÁNDEZ , G. SARROCA , M. PAULINO ZUNINI , S. CASSERONE , G. PÉREZ BORMIDA

Revista Uruguaya de Patología Clínica, v.: 22 p.:405 1990

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00350559

El manuscrito está publicado bajo el nombre Margot Paulino de Blumenfeld

Theoretical studies of Hydrogen-bonded complexes : using semiempirical methods. (Completo, 1990)

E.L. COITIÑO, K. IRVING, J. RAMA, A. IGLESIAS, M. PAULINO ZUNINI, O.N. VENTURA

Journal of Molecular Structure THEOCHEM, v.: 69 p.:405 - 415, 1990

Palabras clave: El artículo está publicado bajo el nombre Margot Paulino de Blumenfeld (nombre de casada)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Facultad de Química - Udelar

ISSN: 01661280

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Molecular Modelling of Glutathione : A Comparison with Crystallographic Data. (Completo, 1990)

M. PAULINO ZUNINI, N. HIKICHI, M. HANSZ, O.N. VENTURA

Journal of Molecular Structure, v.: 210 p.:467 1990

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

E-ISSN: 00222860

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Estudio mecánico cuántico de las conformaciones y espectros electrónicos de algunos ácidos hidroxámicos y sus iones (Completo, 1979)

M. PAULINO ZUNINI, R. Sosa

Anales de la Facultad de Química de Montevideo, v.: 9 p.:28 - 44, 1979

Palabras clave: ácidos hidroxámicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Química Cuántica

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 07971400

<http://riquim.fq.edu.uy/items/show/436>

El artículo está publicado bajo el nombre Margot Paulino de Blumenfeld

NO ARBITRADOS

Una nueva estrategia en la lucha contra la Enfermedad de Chagas : modelado molecular adaptado al diseño de quimioterápicos de baja toxicidad. M.Paulino de Blumenfeld. Intercambio. 1 (1990) 4. Revista no Arbitrada (Completo, 1990)

M. PAULINO ZUNINI

Intercâmbio Revue d'Études Françaises=French Studies Journal, v.: 1 p.:4 1990

Palabras clave: Chagas, nuevos fármacos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Montevideo

E-ISSN: 0873366X

LIBROS

En-clave Inter: Educación superior e Interdisciplina (Participación , 2015)

M. PAULINO ZUNINI Publicado

Editor/Compilador: Espacio Interdisciplinario de la Universidad de la República

Número de volúmenes: 6

Editorial: Espacio Interdisciplinario de la Universidad de la República , Montevideo

Tipo de publicación: Divulgación

Referado

Escrito por invitación

Palabras clave: Bioinformática
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN: 9789974012912
Financiación/Cooperación:
Comisión Académica de Posgrado / Apoyo financiero, Uruguay
Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero, Uruguay
http://www.ei.udelar.edu.uy/renderPage/index/pageId/976#heading_5866

Capítulos:
Creación y Evolución de dos posgrados Interdisciplinarios PEDECIBA-UdelaR: Maestría y Diploma de Especialización en Bioinformática
Página inicial 51, Página final 58

Reporte sobre la Enfermedad de Chagas del Grupo de Trabajo Científico. Programa Especial de Investigaciones y Enseñanzas sobre Enfermedades Tropicales (TDR) /SWG/09 (Compilación , 2007)

M. PAULINO ZUNINI , R. RADII , L. FLOHE Publicado

Número de volúmenes: 1
Número de páginas: 83
Editorial: Organización Mundial de la Salud , Ginebra
Palabras clave: Enfermedad de Chagas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN:
Financiación/Cooperación:
Institución del exterior / Cooperación,
www.who.int/tdr

Molecular Biochemical and Immunological Approaches to Parasitic Diseases. (Participación , 1997)

M. PAULINO ZUNINI Publicado

Editor/Compilador: Swedish Agency for Research Cooperation with Developing Countries (SAREC). Ricardo Ehrlich. Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay
Número de volúmenes: 1
Editorial: Edilce , Montevideo
Palabras clave: chagas antichagasic
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN:
Financiación/Cooperación:
Swedish International Development Agency / Cooperación, Suecia

Capítulos:
Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease: specific action of new drugs against flavoenzymes of the parasitic related organisms and the mammalian host
Página inicial 90, Página final 95

Biology of Parasitism (Participación , 1994)

M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA Publicado

Editor/Compilador: R. Ehrlich and A. Nieto
Editorial: Editorial Trilce , Montevideo
Palabras clave: Computer simulations, molecular graphics
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Modelado Molecular, Enfermedad de chagas
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN:
Financiación/Cooperación:
Institución del exterior / Cooperación,

Capítulos:
Computer simulations and molecular graphics modeling. The 3-D structure of transport proteins.
Página inicial 249, Página final 263

The Chemistry of the XXI Century. Molecular Modelling. (Participación , 1992)

M. PAULINO ZUNINI , F.M.L.G. STAMATO , E. HORJALES , N. HIKICHI , M. HANSZ , B. OLIVA , O. NILSSON , O. TAPIA Publicado

Editor/Compilador: Marco A.C. Nascimento
Editorial: Editorial World Scientific. , NY
Palabras clave: Molecular Modelling, antichagasic
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado Molecular, Enfermedad de chagas
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN:
Financiación/Cooperación:
Institución del exterior / Cooperación,

Capítulos:
Molecular Modelling as a tool to help design selective antichagasic drugs
Página inicial 131, Página final 152

DOCUMENTOS DE TRABAJO

Informes de avance y final del Proyecto Maestría en Bioinformática ANII-PEDECIBA 2010-2015 (2015)

Completo
M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: Bioinformática
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

Informes finale de la fase de organización y fase I proyecto ChagaSpace. Agosto 2003, EARTH, Costa Rica y University of Alabama - Birmingham, CBSE, Agosto 2003. (2003)

Completo
M. PAULINO ZUNINI
Serie: 1, v: 1
Costa Rica
Palabras clave: ChagaSpace
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas
Medio de divulgación: CD-Rom

Informe de avances de la fase de organización y fase I proyecto ChagaSpace. Agosto 2002, EARTH, Costa Rica y University of Alabama - Birmingham, CBSE (2002)

Completo
M. PAULINO ZUNINI
Serie: 1, v: 1
Costa Rica
Palabras clave: ChagaSpace
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas
Medio de divulgación: CD-Rom

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Identification of tyrosine nitration as a nitroxidative postranslational modification in fibrinogen (2023)

romina medeiros , elizabeth lopez , jorge cantero , M. PAULINO , esperanza morato , carlos garcia , antonio martinez

Publicado

Resumen expandido

Evento: Internacional

Descripción: Redox Biology Congress

Ciudad: Vienna, Austria

Año del evento: 2023

Anales/Proceedings: Free Radical Biology and Medicine

Volumen: 201

Fascículo: 1

Serie: Supplement 1

Página inicial: 63

Página final: 64

ISSN/ISBN: ISSN 0891-5849

Publicación arbitrada

Palabras clave: tyrosine nitration posttranslational modification fibrinogen

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2023.03.25>

Financiación/Cooperación:

Facultad de Química / Remuneración, Uruguay

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0891584923003647?via%3Dihub>

Quercetin Protein Targets Identification by Reverse Virtual Screening (2016)

D CARVALHO , M. PAULINO , F POLITICELLI , F ARREDONDO , JUAN ANDRES ABIN-CARRIQUIRY

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: 21st EuroQSAR

Ciudad: Verona - Italia

Año del evento: 2016

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias Biológicas / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

http://www.ldorganisation.com/v2/products.php?cle_menus=1238915962

Unleashing the Graphic Processing Units-based version of NAMD (2015)

Y GONZÁLES , P PEZZATTI , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: The 13th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA-15) Helsinki, Finland, 20-22 August, 2015

Ciudad: HELSINKI

Año del evento: 2015

Publicación arbitrada

Palabras clave: NAMD ACCELERATED MOLECULAR DYNAMICS

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Enseñanza de postgrado en Bioinformática

A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants. (2015)

VEGA-TEIJIDO M , M. PAULINO ZUNINI , LOPEZ C , RODRIGO MJ

Publicado

Resumen expandido
Evento: Internacional
Descripción: XVIII Simposio Brasileiro de Química Teórica - SBQT 2015
Ciudad: Pirenópolis - GO Brasil
Año del evento: 2015
Palabras clave: molecular dynamics carotenoides CCD4a Molecular modelling
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

Modeling studies of CCD4a of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants (2015)

VEGA-TEIJIDO M, M. PAULINO ZUNINI, LOPEZ C, RODRIGO MJ
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Fitoquímicos en Agroalimentación Salud
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2015
Escrita por invitación
Palabras clave: molecular dynamics carotenoides CCD4a Molecular modelling
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

ACTIVIDAD ANTI-INFLAMATORIA DE COMPUESTOS FENÓLICOS EXTRAÍDOS DE PROPÓLEOS Y ORUJOS DE UVA URUGUAYOS: ENSAYOS IN VITRO E IN SILICO (2015)

ALVAREDA E, IRIBARNE F, ESPINOSA V, MIRANDA P, PARDO H, AGUILERA S, M. PAULINO ZUNINI
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Fitoquímicos en Agroalimentación Salud
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2015
Publicación arbitrada
Escrita por invitación
Palabras clave: fenoles ciclooxigenasa COX-2 COX-1
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

Identificación de blancos de acción molecular de quercetina mediante tamizaje reverso (2015)

CARVALHO D, ABIN-CARRIQUIRY A, ARREDONDO F, POLTICELLI F, M. PAULINO ZUNINI
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Fitoquímicos en Agroalimentación Salud
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2015
Publicación arbitrada
Escrita por invitación
Palabras clave: quercetina tamizaje reverso
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
Medio de divulgación: Papel

Acoplamiento molecular de quinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa (2015)

B VERA, K. VAZQUEZ, M. PAULINO ZUNINI, C.O. SALAS
Publicado
Resumen
Evento: Internacional

Descripción: 1er CONGRESO INTERNACIONAL DE VECTORES Y DEL Trypanosoma cruzi: PANORAMA ACTUAL Y EXPECTATIVAS
Ciudad: Guanajato Mexico
Año del evento: 2015
Publicación arbitrada
Palabras clave: tripanotona reductasa quinonas Glutation Reductasa acoplamiento
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel

Análisis estructural y acoplamiento molecular de ariloxiquinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa (2015)

B VERA, K. VAZQUEZ, C.O. SALAS, M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Simposium en Química Medicinal y Farmacéutica

Ciudad: C.F. México

Año del evento: 2015

Palabras clave: tripanotona reductasa quinonas Glutation Reductasa tripanocidas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus (2015)

M. PAULINO ZUNINI, M. VEGA, C. LOPEZ, M.J. RODRIGO

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Torino - Italia

Año del evento: 2015

Publicación arbitrada

Escrita por invitación

Palabras clave: carotenoids

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural

www.chitel2015.org

Análisis estructural y acoplamiento molecular de ariloxiquinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa: una comparación con datos bioquímicos (2015)

B VERA, K. VAZQUEZ, M. PAULINO ZUNINI, C.O. SALAS

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Ciudad: Mexico D.F.

Año del evento: 2015

Publicación arbitrada

Palabras clave: quinonas chagas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Análisis estructural y anclaje molecular de quinonas tripanosomicidas en tripanotona reductasa y glutatión reductasa (2014)

B VERA, V VILLAMIL, K. VAZQUEZ, J SOTO, C.O. SALAS, M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Encuentro de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2014

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanotiona reductasa Glutation Reductasa Anclaje reverso o-quinona tripanosoma cruzi

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Assaying Cyclosporin A and a set of analogues as inhibitors of a T. cruzi cyclophilin by docking and Molecular Dynamics (2014)

M. PAULINO ZUNINI , R. CARRARO , F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 2014

Publicación arbitrada

Palabras clave: cyclosporin cyclophilin Trypanosoma cruzi

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Otros

watoc2014.com

Quercetin Target Identification by Reverse Virtual Screening (2014)

M. PAULINO ZUNINI , D CARVALHO , ABIN A , F ARREDONDO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 2014

Palabras clave: quercetin reverse virtual screening

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Otros

watoc2014.com

Aspergillus nidulans DNA-CreA pattern recognition: in vitro and in silico studies (2014)

M. PAULINO ZUNINI , P. ESPERÓN , C. SCAZZOCCHIO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 2014

Palabras clave: Aspergillus nidulans CreA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Otros

watoc2014.com

Modeling, Docking and Molecular Dynamics studies of CCD4a with three carotenoids substrates. (2014)

M. VEGA , C. LOPEZ , M.J. RODRIGO , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists

Ciudad: Santiago de Chile
Año del evento: 2014
Palabras clave: carotenoids CCD4a
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Otros
watoc2014.com

2-Aryloxy naphthoquinone derivatives as anti-Chagasic agents: study of trypanocidal effect, selectivity, pharmacophoric map and 3D-QSAR (2014)

R. TAPIA, C.O. SALAS, K. VAZQUEZ, J. SOTO, M. PAULINO ZUNINI, J. VARELA, M. GONZALEZ, H. CERECETTO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: EFMC-ISMIC 2014 - XXIII International Symposium on Medicinal Chemistry (EFMC-ISMIC 2014)

Ciudad: Lisboa - Portugal

Año del evento: 2014

Palabras clave: 2-Aryloxy naphthoquinone Chagas disease

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

<http://www.allconferences.com/c/efmc-ismc-2014-xxiii-international-symposium-on-medicinal-chemistry->

STUDY OF THE TIME-COURSE CIS/TRANS ISOMERISATION OF LYCOPENE, PHYTOENE AND PHYTOFLUENE FROM TOMATO (2013)

A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ, M. PAULINO ZUNINI, C. STINCO, X-D. WANG

Publicado

Resumen expandido

Evento: Internacional

Descripción: Pigments In Foods VII

Ciudad: Novara, Italia

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Pigments in Foods VII Congress, held in Novara, Italy, on 18-21 June 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: carotenoides

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

Medio de divulgación: CD-Rom

(<http://pif2013.org/>)

Synthesis and docking studies of new aryloxy heterocyclic quinones as potential trypanosomicidal agents (2013)

R. TAPIA, C.O. SALAS, K. VAZQUEZ, CH. ESPINOSA, J. VARELA, M. GONZÁLES, H. CERECETTO, M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: IUPAC World Chemistry Congress 2013 on 11-16 August 2013 in Istanbul, Turkey

Ciudad: Istanbul

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanotona reductasa Trypanosoma cruzi quinonas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, Diseño de compuestos Bioactivos

Medio de divulgación: Internet

<http://www.AbstractAgent.com/2013iupac>

Estudios in silico de la interacción de BCO1 con carotenoides de origen vegetal (2013)

R. RODRIGUEZ , E. PAZOS , M. PAULINO ZUNINI , M. VEGA , A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: carotenoides, bioinformatica BCMO1

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Modelado por Homología, Anclaje y Dinámica Molecular de tres Dioxigenasas de Rotura de Carotenoides de Cítricos de la Subfamilia CCD4 (2013)

M. VEGA , C. LOPEZ , M.J. RODRIGO , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: dinámica molecular carotenoides, bioinformatica anclaje CCDs

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Antiinflammatory Activity of Phenolic Compounds extracted from Uruguayan Propolis and Grape (Vitis Vinifera) Pomace: In Vitro and In Silico Assays (2013)

E. ALVAREDA , P. MIRANDA , V. ESPINOSA , H. PARDO , S. AGUILERA-MORALES , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: docking antioxidantes, fenoles COXII

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Aspergillus nidulans DNA-CreA pattern recognition: in vitro and in silico studies (2013)

P. ESPERÓN , C. SCAZZOCCHIO , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: Aspergillus nidulans molecular dynamics docking CreA pattern recognition

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Estudio in silico de ligandos de la GNMT: potenciales agentes de diagnóstico PET para el cáncer de próstata (2013)

F. ZOPPOLO , E. SAVIO , P. OLIVER , M. PAULINO ZUNINI , H. ENGLER

Publicado

Resumen

Evento: Nacional
Descripción: ENAQUI Tercer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2013
Publicación arbitrada
Palabras clave: in silico PET cancer GNMT Glycil N metil transferasa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: CD-Rom

Estudio in silico de moléculas marcadoras de astrocitos: potenciales agentes de diagnóstico PET para enfermedad de Alzheimer y otras encefalopatías (2013)

I. KREIMERMAN , E. SAVIO , P. OLIVER , M. PAULINO ZUNINI , H. ENGLER

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI Tercer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: alzheimer in silico PET

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: CD-Rom

SINTESIS, ESTUDIOS DE DOCKING Y EVALUACION DE LA ACTIVIDAD TRIPANOSOMICIDA DE NUEVAS QUINONAS HETEROCICLICAS. (2013)

K. VAZQUEZ , C.O. SALAS , M. PAULINO ZUNINI , R. TAPIA , C. ESPINOZA , J. VARELA , H. CERECETTO , M. GONZÁLES

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: XIX Simposio Nacional de Química Orgánica (XIX SINAQO)

Ciudad: La Plata Argentina

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Editorial: J. Varela, H. Cerecetto, M. González.

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Extraccion, analisis e identificacion de carotenoides

Medio de divulgación: Papel

PREDICCIÓN DE TIEMPOS DE RETENCION CROMATOGRÁFICOS DE FENOLES EN PROPÓLEOS UTILIZANDO MOE-QSAR y MOE-GA (2012)

M. PAULINO ZUNINI , E. ALVAREDA , V. ESPINOSA , L. CALDERÓN

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings: Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Pagina inicial: 60

Pagina final: 60

ISSN/ISBN: 16889819

Publicación arbitrada

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias © SUB

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: qsar, fenoles

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Nuevos agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina obtenidos por QSAR y Filtrado Virtual con Farmacóforo (2012)

A. BOADO , G. SILVA , J.A. ABIN , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Página inicial: 62

Página final: 62

ISSN/ISBN: 16889819

Publicación arbitrada

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: nicotinicos, qsar, farmacóforo

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujo de uva. (2012)

M. PEARCE , A. ROASCIO , A. GAMBARO , H. PARDO , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Página inicial: 122

Página final: 122

Publicación arbitrada

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: orujos, liposomas, antioxidantes

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / procesos extractivos, analisis de antioxidantes, liposomacion

Medio de divulgación: Papel

Estudio farmacofórico de fenoles de uvas y su anclaje a Xantina Oxidasa (2012)

P. MIRANDA , C. ZABALETA , E. BOIDO , H. PARDO , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Página inicial: 43

Página final: 43

ISSN/ISBN: 16889819

Publicación arbitrada

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: xantin oxidasa, fenoles, docking

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Medio de divulgación: Papel

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados (2011)

M. PAULINO ZUNINI , M. PEARCE , A. ROASCIO , M. TAVOLARA , Y. RODRIGUEZ , V. ESPINOSA , S. AGUILERA-MORALES

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI 2011

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, liposomado

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs - fatty acid interactions (2011)

A. ESTÉVES , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI 2011

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: Echinococcus granulosus FABPs

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Estudio in silico de la interacción de citisinoides con la proteína de unión a acetilcolina (2010)

M. PAULINO ZUNINI , J.A. ABIN , B.K. CASSELS , S. WONNACOTT , F. DAJAS

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Sección Biotecnología.

Ciudad: Maldonado

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: agonistas nicotínicos docking

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Modelado por homología y estudio comparativo por anclaje y dinámica molecular de la interacción entre ácidos grasos y las proteínas . EgFABP1 y EgFABP2 (2010)

M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Sección Bioinformática

Ciudad: Maldonado

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: dinámica molecular FABPs docking

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

FATTY ACID BINDING PROTEINS FROM CESTODES (2010)

G. ALVITE , A. KUHN , M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 51st International Conference on the Biosciences of Lipids

Ciudad: Bilbao España

Año del evento: 2010

Palabras clave: cestodes FABPs

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

In silico studies of sesquiterpene lactones with inhibitory activity of Nuclear Factor kappa B (2010)

L.A. CASTRO , S. AGUILERA-MORALES , F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: ISCB Latin-America

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: latonas sesquiterpenicas factor nuclear kappa beta

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Estudio de citotoxicidad de naftofuranquinonas sobre el linfoma T murino EL-4 (2010)

M. DUBIN , M.E. DI ROSSO , M.L. BARREIRO ARCOS , I. ELINGOLD , M. PAULINO ZUNINI , E. DA SILVA , G. CREMASCHI

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Oncology Meeting

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: naftofuranquinonas citotoxicidad

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica

de los procesos cancerosos

Medio de divulgación: Papel

Medidas de la capacidad antioxidante en extractos de propóleos uruguayos (2007)

E. ALVAREDA , I. ELINGOLD , M. CASANOVA , C. ROJAS , M. DUBIN , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: I Latin American Meeting on Medicinal Chemistry

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Palabras clave: antioxidantes propoleos uruguayos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Medio de divulgación: Papel

Estudios QSAR, Screening Virtual y Docking a Xantin Oxidasa de Polifenoles presentes en Productos Naturales (2007)

M. PAULINO ZUNINI , L. CALDERÓN , E. ALVAREDA , C. ROJAS , S. AGUILERA-MORALES

Publicado

Resumen

Evento: Internacional
Descripción: I Latin American Meeting on Medicinal Chemistry
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2007
Publicación arbitrada
Palabras clave: xantin oxidasa, fenoles, docking
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Modelización biomolecular de hormonas neuroendocrinas en soluciones acuosas y fisiológicas (2006)

M.C. DONNAMARIA , M. PAULINO ZUNINI , S.N. MONACHESI , Z. CATALDI , F. LAGE
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: XXXV Annual Meeting of the Argentinean Biophysical Society
Ciudad: Santa fé, Rosario, Argentina
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Palabras clave: hormonas neuroendócrinas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Estudios QSAR, PCA y de Screenig Virtual de polifenoles presentes en mieles, propóleos, marcela, té verde y carqueja (2006)

E. ALVAREDA , M. CEDRÉS-FERNÁNDEZ , R. CARRARO , M. PAULINO ZUNINI
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: V Reunión de la Sociedad Latinoamericana de Fitoquímica y I Congreso de
Fitoterápicos del Mercosur
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Palabras clave: propóleos antioxidantes
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Modeling of biopeptides in physiological solutions. molecular dynamics simulations (2006)

M. PAULINO ZUNINI , C. DONNAMARÍA , R. CARRARO , S.N. MONACHESI , Z. CATALDI , F. LAGE
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Medyfinol. XV Conference on Nonequilibrium Statistical Mechanics and Nonlinear
Physics.
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Palabras clave: dinámica molecular hormonas neuroendocrinas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Measuring Binding Affinities of Phenothiazines to Trypanothione Reductase And Glutathione Reductase By Theoretical Docking And Molecular Dynamics (2005)

F. IRIBARNE , S. AGUILERA-MORALES , M. PAULINO ZUNINI
Publicado
Completo
Evento: Internacional

Descripción: Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins
Ciudad: Dublin
Año del evento: 2005
Publicación arbitrada
Palabras clave: Phenotiazines trypanothione reductase glutathione reductase
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Structure-activity relationships of trypanocides (2005)

M. PAULINO ZUNINI , E. ALVAREDA , P. A. DENIS , M. DUBIN , C. GASTELLU , S. AGUILERA-MORALES , A.O.M. STOPPANI
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins
Ciudad: Dublin
Año del evento: 2005
Publicación arbitrada
Editorial: E.J. Barreiro, M. Dubin, C. Gastellu, S. Aguilera and A. O. M. Stoppani
Palabras clave: trypanocides QSAR
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Modelling and study of cyclosporin A and related compounds in complexes with T. cruzi and human cyclophilins (2005)

R. CARRARO , J. BÚA , A. RUIZ , M. PAULINO ZUNINI
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: MGMS Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins
Año del evento: 2005
Publicación arbitrada
Editorial: . R. Carraro, J. Búa, A. Ruiz
Palabras clave: cyclosporin cyclophilin Trypanosoma cruzi
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Estudios QSAR de polifenoles presentes en mieles y propóleos (2005)

E. ALVAREDA , M. CEDRÉS-FERNÁNDEZ , L. SCHODERLE , C. MATONTE , L. CALDERÓN , M. PAULINO ZUNINI
Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: Primer Congreso de Apicultura del Mercosur
Ciudad: Maldonado
Año del evento: 2005
Publicación arbitrada
Palabras clave: antioxidantes propoleos fenoles
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Anti-Trypanosoma cruzi activity of green tea (Camellia sinensis) catechins. Structure Activity Relationship (2004)

C. GUIDA , M. PAULINO ZUNINI , C. PAVETO , P.A. DENIS , L. CALDERÓN , S. AGUILERA-MORALES , H. TORRES , M.M. FLAWIÁ
Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Advances in synthetic, Combinatorial and Medicinal Chemistry

Ciudad: Moscú

Año del evento: 2004

Publicación arbitrada

Palabras clave: catequinas Trypanosoma cruzi Camellia sinensis Té verde

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Caracterización de una probable enzima del metabolismo de tioles del Trypanosoma cruzi (2003)

G.A. GARCÍA, P.A. GARAVAGLIA, M. PAULINO ZUNINI, T. MINNING, N. AINCIART, M. POTENZAA, A. M. RUIZ

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: . García, G.A.; Garavaglia, P.A.; Paulino, M.; Minning, T.; Ainciart, N.; Potenza, M.; Ruiz, A.M. Federacion Latinoamericana de Parasitología (FLAP), XVI Congreso Latinoamericano de

Parasitología

Ciudad: La Paz

Año del evento: 2003

Publicación arbitrada

Editorial: . García, G.A.; Garavaglia, P.A.; Paulino, M.; Minning, T.; Ainciart, N.; Potenza, M.; Ruiz, A.M

Palabras clave: Trypanosoma cruzi tioles

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología del Trypanosoma cruzi

Medio de divulgación: Papel

Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de tripanotona y glutatión reductasas (2002)

F. IRIBARNE, A. GARCIA OTERO, H. CERECETTO, M. GONZÁLES, S. AGUILERA-MORALES, M. MURPHY, M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanotona reductasa Glutation Reductasa anclaje

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds (2002)

M. PAULINO ZUNINI, F. IRIBARNE, A. GARCIA OTERO, E. ALVAREDA, E. CABRERA, H. CERECETTO, R. DI MAIO, S. AGUILERA-MORALES, M. MURPHY, C. GASTELLU

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: anti-trypanosome

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Docking studies of nitrofurán compounds in trypanothione and glutathione reductases active sites: A

graphical analysis (2002)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , A. GARCIA OTERO , H. CERECETTO , S. AGUILERA-MORALES , M. MURPHY

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Estudios de docking de compuestos fenotiazinicos en tripanotona y glutathione reductasa: Un análisis gráfico (2002)

F. IRIBARNE , A. GARCIA OTERO , E. ALVAREDA , S. AGUILERA-MORALES , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: !a Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanotona reductasa Glutathione Reductasa fenotiazinas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Estudios de farmacología Molecular de Compuestos Bioactivos en Tripanosomatideos (2002)

A. GARCIA OTERO , F. IRIBARNE , E. CABRERA , H. CERECETTO , R. DI MAIO , S. AGUILERA-MORALES , M. MURPHY , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanosomatideos bioactivos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Relaciones Estructura-Actividad y estudio del Mecanismo de Acción de Flavonoides con propiedades reguladoras de la sobrevivencia y muerte celular (2002)

M. PAULINO ZUNINI , L. LAFON , S. SEPÚLVEDA-BOZA , S. AGUILERA-MORALES , F. DAJAS

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR flavonoides muerte celular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

Relaciones Estructura-Actividad para o-naftoquinonas tripanocidas (2002)

E. ALVAREDA , F. IRIBARNE , A. GARCIA OTERO , A.O.M STOPPANI , M. PAULINO ZUNINI
Publicado
Resumen
Evento: Local
Descripción: !a Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2002
Publicación arbitrada
Palabras clave: QSAR o-naftoquinonas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Estudio de docking de derivados fenotiazínicos en los sitios activos de tripanotona reductasa y glutatión reductasa (2001)

F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI , S. AGUILERA-MORALES , A.O.M STOPPANI
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)
Ciudad: Toulouse Francia
Año del evento: 2001
Publicación arbitrada
Palabras clave: tripanotona reductasa Glutatión Reductasa fenotiazinas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Estudios de docking y dinámica molecular en los sitios de unión de tripanotona reductasa y glutatión reductasa (2000)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , S. AGUILERA-MORALES , M. MURPHY , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)
Ciudad: Caxambu. Minas Gerais. Brasil
Año del evento: 2000
Publicación arbitrada
Palabras clave: dinámica molecular tripanotona reductasa docking Glutatión Reductasa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Diseño asistido por computadora de compuestos tripanosomatídeos potencialmente activos (2000)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. HANSZ , J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR , I. CARACELLI ,
G. SEOANE , H. CERECETTO , C. OLEA-AZAR , A.O.M STOPPANI , M. BERRIMAN , A.H.
FAIRLAMB , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)
Ciudad: Caxambú-Minas Gerais - Brasil
Año del evento: 2000
Publicación arbitrada
Palabras clave: anti-tripanosoma
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Proton relays at the N-site and C-site of glutathione reductase. Molecular electronic antecedents for a sequentially-ordered mechanism (1998)

F. IRIBARNE , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Third European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics

Ciudad: Granada - Spain

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Palabras clave: proton relay trypanothione reductase N-site glutathione reductase C-site

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Theoretical and experimental studies of interaction between CreA and DNA target in Aspergillus nidulans (1998)

M. PAULINO ZUNINI , P. ESPERÓN , M. VEGA , M. VITAL , C. SCAZZOCCHIO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: VII Congreso Iberoamericano de Biología Celular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Palabras clave: Aspergillus nidulans CreA DNA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Crystal structure of trypanothione analogues designed to fit the active site: Comparison between optimized and docked structures (1997)

J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR , M. PAULINO ZUNINI , I. CARACELLI , M. HANSZ , H.

CERECETTO , G. SEOANE , R. DI MAIO , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: 20a Reuniao Anual. SBQ

Ciudad: Pocos das Caldas - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase docking crystal structure

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Structural Aspects of Specificity in Trypanothione and Glutathione Reductase Binding Sites and the design of new compounds with potential and trypanosomal activity (1997)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , N. HIKICHI , M. HANSZ , M. VEGA , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 6th COST meeting on Anti Parasite Chemotherapy

Ciudad: Leuven - Belgium

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase Trypanosoma cruzi

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Crystal structures of trypanothione analogues designed to fit the active site: Comparison between optimized geometries and docked structures (1997)

M. PAULINO ZUNINI , I. CARACELLI , M. HANSZ , F. FROLOW , H. CERECETTO , G. SEOANE , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 6th COST meeting on Anti Parasite Chemotherapy

Ciudad: Leuven - Belgium

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: docking crystal structure trypanothione analogues

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Activity Physicochemical Properties relationships of Nitrofurans Analogues (1997)

R. DI MAIO , M. PAULINO ZUNINI , G. SEOANE , H. CERECETTO , C. OLEA-AZAR , M. HANSZ , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: 20a Reuniao Anual. SBQ

Ciudad: Pocos das Caldas - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR nifurtimox

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

Síntesis de Potenciales Inhibidores de Trypanothione Reductasa. Semicarbazonas de Furfural y de Tiofencarbaldehído. (1997)

M. PAULINO ZUNINI , R. DI MAIO , G. SEOANE , H. CERECETTO , M. RISSO , A. DENICOLA , C. QUIJANO , G. PELUFFO , M.A. BASSOMBRIO

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XI Simposio de Investigadores Argentinos de Química Orgánica

Ciudad: Cordoba - Argentina

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: tripanothione reductasa semicarbazonas tiofenilcarbaldehído

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

Possible role of proton relays in the electronic mechanism of glutathione reductase (1997)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: IX Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: glutathione reductase proton relay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

Complexes of T. cruzi: Trypanothione Reductase and 5-nitrofurán derivatives, a theoretical study (1997)

I. CARACELLI, M. PAULINO ZUNINI, M. HANSZ, F. IRIBARNE, H. CERECETTO, R. DI MAIO, G. SEOANE, J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR, O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XIV Reuniao da Sociedade Brasileira de Cristalografía

Ciudad: Sao Carlos - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase Trypanosoma cruzi nitrofuranos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Activity-physicochemical properties relationships of nifurtimox analogues (1997)

H. CERECETTO, R. DI MAIO, M. GONZALEZ, A. DENICOLA, G. PELUFFO, C. QUIJANO, AM ATRIA, C. OLEA-AZAR, M. HANSZ, M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 1 st Congress of Pharmaceutocal Sciences

Ciudad: Riberáo Preto - SP - Brasil

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Palabras clave: chagas nifurtimox SAR

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

Crystal Structure and Targeted designed trypanothione analogues: A comparison (1996)

J. ZUCKERMANN-SPECTOR, M. PAULINO ZUNINI, I. CARACELLI, M. HANSZ, H. CERECETTO, R. DI MAIO, G. SEOANE, O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: WATOC

Ciudad: Jerusalem Israel

Año del evento: 1996

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase crystal

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

Crystal structure of 7-trifluoromethyl-isatin (1996)

J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR, G. FINAII, M. PAULINO ZUNINI, I. CARACELLI, M.T.C. BARCELLOS, A. DA CUNHA PINTO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 19a Reuniao Anual da SBQ

Ciudad: Sao Paulo

Año del evento: 1996

Publicación arbitrada

Palabras clave: 7-trifluormethyl isatin crystal structure

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Obtención de nuevas drogas con posible actividad antichagásica (1995)

M. PAULINO ZUNINI , G. SEOANE , H. CERECETTO , M. GONZÁLES , R. DI MAIO , G. IBARRURI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: VII Jornadas Científicas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: antichagasicas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Molecular dynamics study of mutant G418W of glutathione reductase (1995)

N. HIKICHI , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Pucon - Chile

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular dynamics GR G418W

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

Estudios Dinámicos del mutante G446G de la enzima glutathione reductasa (1995)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: VII Jornadas Científicas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: dinámica molecular Glutathione Reductasa

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites (1995)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , N. HIKICHI , M. HANSZ , M. VEGA , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Pucon - Chile

Año del evento: 1995

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Estructura-actividad en naftoquinonas (1995)

M. HANSZ , M. PAULINO ZUNINI , M.P. MOLINA PORTELA , S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL , A.O.M

STOPPANI

Publicado

Resumen
Evento: Internacional
Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ciudad: Pucon - Chile
Año del evento: 1995
Publicación arbitrada
Palabras clave: QSAR o-naftoquinonas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Perturbation-relaxation molecular dynamics simulations of zinc-finger protein ZIF268 (1995)

M. PAULINO ZUNINI , G. ROXSTROM , I. VELAZQUEZ , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ciudad: Pucon - Chile
Año del evento: 1995
Publicación arbitrada
Palabras clave: molecular dynamics Zinc finger ZIF268
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Relacion Estructura-Actividad en naftoquinonas lipofilicas (1994)

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , G. TABARES , M.P. MOLINA PORTELA , S.H. FERNANDEZ-VILLAMIL , A.O.M STOPPANI
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: XX Congreso Argentino de Química
Ciudad: Cordoba - Argentina
Año del evento: 1994
Publicación arbitrada
Palabras clave: QSAR o-naftoquinonas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

A developmental gene of Echiococcus granulosus codes for a 1.5. kilodalton polypeptide related to fatty acid binding protein (1994)

M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES , B. DELLAGIOVANNA , G. TABARES , R. EHRlich
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Santiago Southern Summer Syposium
Ciudad: Santiago de Chile
Año del evento: 1994
Publicación arbitrada
Palabras clave: Echinococcus granulosus FABPs
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Interacción de 2,4,6-trinitrobencensulfonato con glutation reductaa (1993)

M. PAULINO ZUNINI , D. OFSIEVICH , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Internacional

Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Palabras clave: glutathione reductase 2,4,6.trinitrobenzensulfonato
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Comparación de los sitios de unión en glutatión reductasa y tripanotona reductasa (1993)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , F. STAMATO , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Palabras clave: tripanotona reductasa Glutation Reductasa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Estudio de la especificidad de sustratos disulfuro de tripanotona reductasa (1993)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. VEGA , G BOUGARIN , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Palabras clave: tripanotona reductasa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel

Study of substrate specificity in trypanothione reductase, (1993)

M. PAULINO ZUNINI , F. IRIBARNE , M. VEGA , G BOUGARIN , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: VII Simposio Brasileiro de Química Teórica
Ciudad: Caxambú Brasil
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Palabras clave: disulfide specificity
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química

Unión de nitrofuranos con sustituyentes tipo espermidina y tripanotona reductasa (1993)

M. PAULINO ZUNINI , M. KANN , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Palabras clave: tripanotona reductasaespermidina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Relaciones estructura-actividad y binding a glutatión reductasa de naftoquinonas (1993)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , F. STAMATO , A.O.M STOPPANI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR Glutation Reductasa o-naftoquinonas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

A molecular dynamics study of the structure of glutathione reductase (1993)

N. HIKICHI , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: VI Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular dynamics glutathione reductase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Study of disulfide specificity in Trypanothione reductase (1993)

M. PAULINO ZUNINI , M. VEGA , F. IRIBARNE , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: VII Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase disulfide

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Computer simulations and molecular graphics modelling. The 3D structures of transport proteins (1993)

M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: The International Workshop on biology of Parasitism

Ciudad: Maldonado - Solis

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular graphics modelling 3D structures transport proteins parasitism

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Molecular Modelling and Dynamics of EgDF1 (1993)

M. PAULINO ZUNINI , A. ESTÉVES , B. DELLAGIOVANNA , G. TABARES , R. EHRLICH , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: The International Workshop on biology of Parasitism

Ciudad: Maldonado - Solis

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: molecular dynamics EgDf1 fatty acid carrier proteins

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

Dinamica molecular de glutation reductasa en el diseño de drogas antichagasicas selectivas (1993)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , O. TAPIA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Palabras clave: dinámica molecular Glutation Reductasa antichagasicas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

Synthesis of possible inhibitors of the trypanothione reductase trypanocidal activity (1992)

G. SEOANE , H. CERECETTO , M. GONZÁLES , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: I Jornada de pesquisa da AUGM

Ciudad: Santa Maria

Año del evento: 1992

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase inhibitors

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

Propiedades dependientes de las estructuras electrónicas de los nitrofuranos y su correlación con las actividades biológicas (1991)

M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Local

Descripción: II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: QSAR nitrofuranos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Medio de divulgación: Papel

Modelado molecular de flavoproteinas relacionadas con el metabolismo del Trypanosoma y huéspedes mamíferos: Glutation Reductasa, Lipoamida Deshidrogenasa y Tripanotiona Reductasa (1991)

M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Local

Descripción: II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase lipoamide deshydrogenase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Accion de nitrofuranos de síntesis sobre modelo murino de infección por T. cruzi (1991)

E. CIVILA , R. SALVATELLA , R. MANCEBO , R. ROSA , Y. BADMAJIAN , G. MENDARO , M.

FERNANDEZ , H. CERECETTO , S. ONETTO , M. PAULINO ZUNINI , A.O.M STTOPPANI

Publicado

Resumen

Evento: Local

Descripción: II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: Trypanosoma cruzi nitrofuranos Modelo Murino

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Comparacao dos sitios activos e relacao entre os idstintos mecanismos de acao das enzimas tripanotiona reductase, gluathiona reductase e lipamida desidrogenase (1991)

E. HORJALES , F. STAMATO , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: 14a Reunioao Anual da Sociedade Brasileira de Química

Ciudad: Caxambú - Brasil

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase lipoamide deshydrogenase

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Modelado Molecular de Nitrofuranos empleando métodos mecánico moleculares y químico-cuánticos. Comparación con datos cristalográficos (1991)

M. HANSZ , N. HIKICHI , M. PAULINO ZUNINI , A.O.M STOPPANI

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: VI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado - Piriápolis

Año del evento: 1991

Publicación arbitrada

Palabras clave: nitrofuranos Mecánica Molecular Mecánica Cuántica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Gráficos moleculares: Aplicación al Estudio Comparativo de Flavoproteínas (1991)

N. HIKICHI , M. HANSZ , M. PAULINO ZUNINI

Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: VI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias
Ciudad: Maldonado - Piriápolis
Año del evento: 1991
Publicación arbitrada
Palabras clave: Graficos Moleculares Flavoproteinas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Electronic properties and free radical production by nitrofurans compounds (1991)

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , A.O.M STOPPANI
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: International Symposium of Active Oxygen Species and Human Health
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 1991
Publicación arbitrada
Palabras clave: free radicals nitrofurans electronic properties
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Trypanothione Reductase - NADPH complex: Model building and docking studies of nitrofurans inhibitors (1991)

E. HORJALES , F. STAMATO , B. OLIVA , M. PAULINO ZUNINI , O. NILSSON , M.I. AMBROSSIO , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: VI Simposio Brasileiro de Química Teórica
Ciudad: Caxambú - Brasil
Año del evento: 1991
Publicación arbitrada
Palabras clave: trypanothione reductase docking nitrofurans
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

A Computer Modelling Study of the Interactions between NADPH and the Flavoenzymes Glutathione-Reductase and Trypanothione Reductase (1991)

E. HORJALES , B. OLIVA , F. STAMATO , M. PAULINO ZUNINI , O. TAPIA
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: VI Simposio Brasileiro de Química Teórica
Ciudad: Caxambú - Brasil
Año del evento: 1991
Publicación arbitrada
Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase NADPH
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Relación estructura actividad de alfa-lapachona y o-naftoquinonas relacionadas (1991)

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , G. TABARES , M.N. FADEL , L. CADENAZZI , A.O.M STTOPPANI

Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: Congreso Latinoamericano de Parasitología. I Congreso Uruguayo de Parasitología
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 1991
Publicación arbitrada
Palabras clave: QSAR alfa-lapachona o-naftoquinonas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Accion de Nitrouranos de Síntesis sobre Modelo Murino de Infección por Trypanosoma cruzi (1990)

E. CIVILA , R. SALVATELLA , R. MANCEBO , R. SOSA , Y. BADMAJIAN , G. MENDARO , M. FERNANDEZ , H. CERECETTO , S. ONETTO , M. PAULINO ZUNINI , A.O.M STTOPPANI

Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: Congreso Argentino de Protozoología y Reunión sobre Enfermedad de Chagas
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Palabras clave: Trypanosoma cruzi nitrofuranos Modelo Murino
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Comparison of Gluathione and Trypanothione Reductase-Ligand interactions: X-Ray Crystallography and Molecular Mechanics on Struture-Activity Analysis. (1990)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: International Symposium on Crystallography and Molecular Biology
Ciudad: Sao Paulo
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Docking Studies on inhibition of Glutathione Reductase by Nitrofurans: its Relation with the Active Site of Trypanothione Reductase (1990)

M. PAULINO ZUNINI , E. HORJALES

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: International Symposium on Crystallography and Molecular Biology
Ciudad: Sao Paulo
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Palabras clave: docking glutathione reductase nitrofurans
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica
Medio de divulgación: Papel

Binding Site of Nitrofurans Derivatives into the Active Site of Gluathione and Trypanothione Reductase Modelled using Docking Methods and Molecular Mechanics (1990)

E. HORJALES , M. PAULINO ZUNINI

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: International Symposium on Crystallography and Molecular Biology
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Palabras clave: trypanothione reductase glutathione reductase Binding Site nitrofurans
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Generación de Radicales Aniones: Correlaciones Estructura-Actividad para Nitrofuranos (1990)

M. PAULINO ZUNINI , M. HANSZ , N. HIKICHI , A.O.M STTOPPANI

Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: XIX Congreso Latinoamericano de Química
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Palabras clave: QSAR nitrofuranos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Comparación de datos cristalográficos con la estructura obtenida utilizando diversos campos de fuerza para el Glutati6n (GSH) (1990)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: XIX Congreso Latinoamericano de Química
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Palabras clave: Glutation campos de fuerza
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel

Estudio de la Relacion de Estructura-ACtividad para derivados del 5-nitrofurano usando técnicas cromatográficas y computacionales. II congreso Latinoamericano de Cromatografía. Buenos Aires. Octubre 1988. (1990)

M. PAULINO ZUNINI , B. MESTER , G SERRA , RM CLARAMUNT , AOM STOPPANI

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Año del evento: 1990
Palabras clave: HPLC 5-nitrofurano
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química

Comparación de datos cristalográficos con la estructura obtenida utilizando diversos campos de fuerza para el Glutati6n (GSH) (1990)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: XIX Congreso Latinoamericano de Química
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 1990

Publicación arbitrada
Palabras clave: Glutation campos de fuerza
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Inhibición por nitrofuranos de la lipoperoxidación microsomal hepática y reacciones cataliadas por el citocromo P-450 (1990)

M. DUBIN , S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL , M. PAULINO ZUNINI , A.O.M STTOPPANI

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Congreso Latinoamericano de Farmacología
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Palabras clave: nitrofuranos lipoperoxidación microsomal hepatica
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Potencialidad tóxica del Nifurtimox y análogos, su relación con el potencial formal del par R-NO₂- R-NO₂ y densidad ekectrónica en el grupo nitro (1990)

H. CERECETTO , M. GONZÁLES , M. HANSZ , N. HIKICHI , S. ONETTO , F. ZINOLA , M. PAULINO ZUNINI

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Congreso Argentino de Protozoología y Reunión sobre Enferedad de Chagas
Ciudad: Buenos Aire
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Palabras clave: nifurtimox potencial formal
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgación: Papel

Inhibición de Glutati6n Reductasa: Correlaci6n Estructura-Actividad para 5-Nitrofuranos (1990)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ

Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripci6n: XIX Congreso Latinoamericano de Química
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 1990
Publicaci6n arbitrada
Palabras clave: QSAR nitrofuranos Glutation Reductasa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica
Medio de divulgaci6n: Papel

Modelado te6rico de la estructura del Glutati6n oxidado generado por Mecánica Molecular (1989)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , F. STAMATO

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripci6n: V Simposio Brasileiro de Química Te6rica
Ciudad: Caxambú - Brasil
Año del evento: 1989
Publicaci6n arbitrada
Palabras clave: Glutation Mecanica Molecular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Estudio de la Relación Estructura Actividad para derivados del 5-nitrofurano utilizando técnicas cromatográficas y computacionales. Parte II. (1989)

N. HIKICHI , H. CERECETTO , S. ONETTO , B. MESTER , M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: IV Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1989

Publicación arbitrada

Palabras clave: in silico chaga's disease nitrofuranos HPLC

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Medio de divulgación: Papel

Comparación de datos Cristalográficos para la Estructura del Glutati6n con Cálculos Mecánico Moleculares (1989)

M. PAULINO ZUNINI , N. HIKICHI , M. HANSZ , O.N. VENTURA

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: La Plata Argentina

Año del evento: 1989

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Extracción, análisis e identificación de carotenoides

Medio de divulgación: Papel

Estudio teórico de la correlación estructura-actividad para éteres halogenados anestésicos o convulsivantes (1987)

M. PAULINO ZUNINI , P. RAIMONDA , S. LONATI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 4º Congreso Argentino de Farmacia y Bioquímica Industrial

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 1987

Palabras clave: anestésicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

Theoretical studies of the molecular complexes between hydroxamic and boric acids. (1987)

M. PAULINO ZUNINI

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: IV Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú. Minas Gerais. Brasil

Año del evento: 1987

Publicación arbitrada

Palabras clave: hydroxamic acids

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

Estudio teórico de la correlación estructura-actividad para hidrocarburos halogenados con actividad anestésica (1986)

M. PAULINO ZUNINI , J RAMA , A IGLESIAS , ON VENTURA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1986

Publicación arbitrada

Palabras clave: anestésicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Estructura electronica de acidos hidroxamicos y algunos derivados (1983)

M. PAULINO ZUNINI , A IGLESIAS , RM SOSA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Tercer Congreso Argentino de Fisico Quimica

Ciudad: La Plata Argentina

Año del evento: 1983

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

Estudios sobre la potencia anestésica de haloetanos I. Investigación teórica de relaciones estructurales (1983)

M. PAULINO ZUNINI , A IGLESIAS , ON VENTURA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Tercer Congreso Argentino de FisicoQuimica

Ciudad: La Plata, Argentina

Año del evento: 1983

Publicación arbitrada

Palabras clave: haloetanos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Estudio Mecanico Cuantico de las conformaciones y espectros electrónicos de algunos ácidos hidroxámicos y sus iones (1979)

M. PAULINO ZUNINI , RM SOSA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Jornadas Química. Cicuentenario de la Facultad de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1979

Palabras clave: ácidos hidroxámicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel

TEXTOS EN PERIÓDICOS O REVISTAS

PROVITIS: UN CONSORCIO ENTRE LA CIENCIA Y LA PRODUCCIÓN (2015)

VOCES TECNOLÓGICAS

Revista
M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: propóleos orujos de uvas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Desarrollo de Fitonutrientes
Fecha de publicación: 03/03/2015
Lugar de publicación: MONTEVIDEO

Científicos Uruguayos contra el Mal de Chagas. Reportaje a cargo de Nelson Días. (2005)

Caras y Caretas
Revista
M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: chagas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel
Fecha de publicación: 20/07/2005
Lugar de publicación: Montevideo

Propiedades fitonutrientes y fitoterapéuticas de hierbas medicinales y productos naturales (2004)

Caras y Caretas
Revista
M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: fenoles fitonutrientes
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel
Fecha de publicación: 01/10/2004
Lugar de publicación: Montevideo

Mal de Chagas, Mal de Muchos. Nuevos Fármacos para Combatirlo, (1982)

Cuadernos de Marcha. Tercera Epoca, Año VIII v: 76, 10, 10
Revista
M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: Mal de Chagas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel
Fecha de publicación: 30/10/1982
Lugar de publicación: Montevideo

Producción técnica

OTRAS PRODUCCIONES

CURSOS DE CORTA DURACIÓN DICTADOS

Data Science para Químicos (2020)

M. PAULINO , P GARCIA
Extensión extracurricular
País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Tipo de participación: Organizador
Unidad: Departamento DETEMA - Bioinformática - Facultad de Química

Duración: 1 semanas
Lugar: Montevideo
Ciudad: Montevideo
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Química Unidad de Educación Permanente
Palabras clave: Data Science
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Data Science

DESARROLLO DE MATERIAL DIDÁCTICO O DE INSTRUCCIÓN

Bioinformática II - Estructural (2020)

M. PAULINO, F IRIBARNE, J. Cantero, AC Ballesteros

País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Web: <http://cursos.quimica.fq.edu.uy/course/view.php?id=416>
Bioinformática II - Estructural plataforma moodle
Palabras clave: Bioinformática Enseñanza Posgrado
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información / Bioinformática Estructural

Diseño de Compuestos Bioactivos (2020)

M. PAULINO, J. Cantero, AC Ballesteros

País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Web: <http://cursos.quimica.fq.edu.uy/course/view.php?id=444>
Diseño de Compuestos Bioactivos - Estructural plataforma moodle
Palabras clave: Diseño de Compuestos Bioactivos Enseñanza semipresencial Plataforma moodle
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación e Información / Bioinformática Estructural

Taller de Simulaciones Biomoleculares (2020)

M. PAULINO, F IRIBARNE, J Cantero, AC Ballesteros

País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Web: <http://cursos.quimica.fq.edu.uy/course/view.php?id=443>
Taller de Simulaciones Biomoleculares
Palabras clave: Simulaciones Biomoleculares Avanzadas Bioinformática Estructural

PROGRAMAS EN RADIO O TV

Avances en la producción de productos de alto valor agregado obtenidos a partir de orujos de uvas Tannat (2021)

M. PAULINO
Entrevista
País: Uruguay
Idioma: Español
Emisora: TVCiudad
Fecha de la presentación: 08/11/2021
Tema: Difusión de resultados de proyecto ANII Alianza Orujos de uvas Tannat
Ciudad: Montevideo
Palabras clave: uvas tannat orujos vinculos con empresas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Multidisciplina
Bioinformática Biología Química analítica Desarrollo de Alimentos funcionales

Desarrollo de kits para el muestreo durante la pandemia de COVID-19 (2019)

M. PAULINO

Entrevista

País: Uruguay

Idioma: Español

Emisora: Radio Carve

Fecha de la presentación: 22/08/2019

Tema: Desarrollo de kits para el muestreo durante la pandemia de COVID-19

Ciudad: Montevideo

Palabras clave: COVID-19 muestreo hisopos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Ciencias de la Salud / Ciencias de la Salud / Desarrollo de kits de muestreo COVID-19

Desarrollo de kits para el muestreo durante la pandemia de COVID-19 (2019)

M. PAULINO

Entrevista

País: Uruguay

Idioma: Español

Emisora: Canal 10

Tema: Desarrollo de kits para el muestreo durante la pandemia de COVID-19

Palabras clave: COVID-19 hisopos kits de muestreo

Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Ciencias de la Salud / Ciencias de la Salud / Diseño de kits de muestreo

Desarrollo de kits para el muestreo durante la pandemia de COVID-19 (2019)

M. PAULINO

Entrevista

País: Uruguay

Idioma: Español

Emisora: Canales 12, 5, 4, TV Ciudad y La Diaria

Tema: Desarrollo de kits para el muestreo durante la pandemia de COVID-19

Palabras clave: COVID-10 desarrollo de kits de muestreo hisopos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Ciencias de la Salud / Ciencias de la Salud / Desarrollo kits de muestreo (multidisciplinario)

ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

XLVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2023) Trabajo relevante

M. PAULINO

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay, Facultad de Ingeniería, UdelaR, Edificio Polifuncional "Jose Luis Massera" Senda Nelson Landoni 631, 11200 Montevideo

Idioma: Español

Web: quitel23.site

Duración: 1 semanas

Evento itinerante: SI

Catálogo: SI

Institución Promotora/Financiadora: Área Bioinformática - DETEMA Facultad de Química UdelaR

Palabras clave: Química Teórica Congreso Organización

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Química Teórica

X Congreso de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática (SOIBIO+10) (2019) Trabajo relevante

M. PAULINO ZUNINI, F. ALVAREZ, J. DE LAS RIVAS

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay, Sala Multifuncional JL Massera - Facultad de Ingeniería - UdelaR Montevideo

Idioma: Español

Web: <https://sites.google.com/view/soibio19/>

Duración: 1 semanas

Evento itinerante: SI
Catálogo: SI
Institución Promotora/Financiadora: Universidad de la República
Palabras clave: Bioinformática Congreso Internacional
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2016)

M. PAULINO ZUNINI
Congreso
Sub Tipo: Organización
Lugar: Uruguay ,Hotel Radisson Montevideo
Idioma: Español
Web: opc.quitel2016.congresoselis.info
Duración: 1 semanas
Evento itinerante: SI
Catálogo: SI
Institución Promotora/Financiadora: Universidad de la República

XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2013)

M. PAULINO ZUNINI
Congreso
Sub Tipo: Organización
Lugar: Uruguay ,Argentino Hotel Piriápolis MALdonado
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Web: sub.fcien.edu.uy
Duración: 1 semanas
Evento itinerante: SI
Catálogo: SI
Institución Promotora/Financiadora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2001)

M. PAULINO ZUNINI
Congreso
Sub Tipo: Organización
Lugar: Uruguay ,Hotel Radisson Montevideo
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Duración: 1 semanas
Evento itinerante: SI
Catálogo: SI
Institución Promotora/Financiadora: Universidad de la República

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

COMITÉ EVALUACIÓN DE PROYECTOS

Comité Académico Fondo Clemente Estable - Áreas Básicas (2019 / 2019)

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay
Cantidad: De 5 a 20

Comité Académico Fondo Clemente Estable - Áreas Básicas (2018 / 2018)

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Fondecyt - Chile - Llamado a Proyectos de Investigación y Desarrollo (2017 / 2018)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Fondo Nacional Desarrollo Científico y Tecnológico , Chile
Cantidad: De 5 a 20

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

CSIC I+D (2020 / 2020)

Uruguay
Cantidad: Menos de 5

CAP Becas de posgrado (2020 / 2020)

Uruguay
Cantidad: Menos de 5

CSIC (2014 / 2014)

Uruguay
CSIC
Cantidad: Menos de 5

Agencia Nacional de Investigacion e Innovación - Llamado Fondos Clemente Estable (2012 / 2012)

Uruguay
Agencia Nacional de Investigacion e Innovación - Llamado Fondos Clemente Estable
Cantidad: Menos de 5

FOCANLIS (2009 / 2009)

Argentina
FOCANLIS
Cantidad: Menos de 5

IFS (2005 / 2005)

Suecia
IFS
Cantidad: Menos de 5

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

COMITÉ EDITORIAL

Review Editor del Editorial Board of Biological Modelons and Simulation (specialty section of Frontiers in Molecular Biosciences and FRontiers in Applied Methematics and Statistics) (2022 / 2022)

Tipo de publicación: Revista
Editorial: Review Editor del Editorial Board of Biological Modelons and Simulation (specialty section of Front
Cantidad: Menos de 5
Review Editor del Editorial Board of Biological Modelons and Simulation (specialty section of Frontiers in Molecular Biosciences and FRontiers in Applied Methematics and Statistics)

Current Topics in Medicinal Chemistry (2013 / 2013)

Cantidad: Menos de 5

Journal of Biomedicine and Biotechnology (2011 / 2011)

Cantidad: Menos de 5

Journal of Chilean Chemistry Society (2008 / 2014)

Cantidad: De 5 a 20

Journal of Molecular Modeling (2005 / 2011)

Cantidad: De 5 a 20

Journal of Molecular Structure (2003 / 2003)

Cantidad: Menos de 5

EVALUACIÓN DE EVENTOS Y CONGRESOS

Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Maldonado, Piriápolis. Mayo 2010. (2010)

Uruguay

JURADO DE TESIS

Diseño e implementación de nuevas herramientas para la solubilización y cristalogénesis de proteínas (2014)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

Nivel de formación: Doctorado

Maestría en Bioinformática (2012 / 2018)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Rectorado , Uruguay

Nivel de formación: Maestría

Trabajos de final de Carrera (Química Farmacéutica, Ingeniería Alimentaria) (2012 / 2018)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Centro de Bioinformática - DETEMA , Uruguay

Nivel de formación: Grado

Doctorado en Ciencias Biológicas (2004 / 2018)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay

Nivel de formación: Doctorado

Doctorado en Química (2004 / 2019)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Centro de Bioinformática - DETEMA , Uruguay

Nivel de formación: Doctorado

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

Desarrollo in silico de sensores fluorescentes para diseccionar vías de señalización celular (2017 - 2022)

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Centro de Bioinformática - DETEMA , Uruguay

Programa: Doctorado en Química

Tipo de orientación: Asesor

Nombre del orientado: Florencia Klein

País: Uruguay

Palabras Clave: Coarse grain sensores fluorescentes

Áreas de conocimiento:

Caracterización genómica y proteómica de dioxigenasas responsables del clivaje de carotenoides de especies de citrus (2016 - 2021)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Programa: Maestría en Bioinformática
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Jorge Cantero
País: Uruguay
Palabras Clave: citrus oxidasas de carotenoides
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Postgrados en Bioinformática

Pirazolo[1,5-a]pirimidinas con actividad antitumoral: Identificación de receptores y diseño de derivados

Tesis de maestría
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de los Andes / Computational Bio-Organic Chemistry ? COBO Departamento de Química , Colombia
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Andrés Camilo Ballesteros
País: Colombia
Palabras Clave: pirazolo pirimidinas - cáncer
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Anclaje Reverso aplicado al descubrimiento de nuevos blancos para el desarrollo de antichagásicos

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Área Bioinformática - DETEMA, Uruguay
Nombre del orientado: Brenda Vera
País: Uruguay
Palabras Clave: Anclaje reverso o-quinona Chagas disease
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Relación Estructura-Actividad de Polifenoles: Desarrollo y Aplicación de Técnicas de Farmacología Molecular y Estudios de Unión a Blancos Involucrados en los Mecanismos de Acción

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Elena Alvareda Migliaro
País: Uruguay
Palabras Clave: fenoles oxidoreductasas quinonas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Identificación de los blancos de acción molecular de flavonoides mediante tamizaje virtual en librerías de estructuras tridimensionales de proteínas

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Área Bioinformática - DETEMA, Uruguay
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Diego Carvalho
País: Uruguay
Palabras Clave: flavonoides blancos de acción tamizaje virtual
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

Dinámica Molecular en GPU aplicada a complejos membrana-proteína-ligando

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Yamandú Gonzáles
País: Uruguay
Palabras Clave: Dinámica Molecular Graphic Processor Unit
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Modelado y estudio de complejos de Ciclosporina A y compuestos relacionados con una ciclofilina de Trypanosoma cruzi

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Roberto Carraro
País: Uruguay
Palabras Clave: bioinformática estructural
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Diseño Racional y caracterización farmacológica de nuevos agonistas nicotínicos derivados de la cistina

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Programa: Doctorado en Química
Nombre del orientado: Juan Andrés Abin Carriquiry
País: Uruguay
Palabras Clave: agonistas nicotínicos cistina
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de agonistas nicotínicos del nAChR

Interacciones moleculares de ligandos a las flavoenzimas glutatión reductasa, tripanotona reductasa y lipoamida deshidrogenasa Trabajo relevante

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Federico Iribarne
País: Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Estudio de las interacciones del represor CreA con el ADN en Aspergillus nidulans

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Patricia Esperón
País: Uruguay
Palabras Clave: Aspergillus nidulans
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Simulaciones de Dinámica Molecular, Modelado Biomolecular

Modelado molecular y estudios de mecanismos de acción de proteínas asociadas a enfermedades parasitarias. Defensa de Tesis Trabajo relevante

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Programa: Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Mauricio Vega
País: Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Bases Moleculares de la reactividad de flavoenzimas hacia drogas y ligando Trabajo relevante

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay

Programa: Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Nombre del orientado: Federico Iribarne

País: Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

GRADO

ESTUDIO DE LAS ENZIMAS DE EXPRESIÓN EN HUMANOS BCO1 y BCO2 E INTERACCIÓN CON POSIBLES LIGANDOS (2020 - 2022)

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / DETEMA

Bioinformática, Uruguay

Programa: Licenciatura en Química

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Anabela Martínez

País: Uruguay

Palabras Clave: carotenoides BCO1 BCO2 dioxigenasas humanas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática

Carotenoides en hojas de citrus: caracterización in vitro

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Facultad de Ingeniería, Uruguay

Programa: Licenciatura en Biotecnología

Nombre del orientado: Valentina Velazco

País: Uruguay

Palabras Clave: carotenoides, bioinformática

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Química Médica

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujos de uva

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay

Programa: Ingeniería de Alimentos

Nombre del orientado: Marcela Pearce

País: Uruguay

Palabras Clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, fenoles

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Desarrollo de extractos antioxidantes a partir de desechos industriales

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujos de uva

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay

Programa: Ingeniería de Alimentos

Nombre del orientado: Antonella Roascio

País: Uruguay

Palabras Clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, liposomado

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Liposomas de extractos antioxidantes encapsulados a partir de desechos industriales

**ANÁLISIS IN VITRO E IN SILICO DE LA ACTIVIDAD INHIBITORIA SOBRE XANTINA OXIDASA, Y
ÁNÁLISIS DE LA CAPACIDAD CAPTADORA DE RADICALES LIBRES DE EXTRACTOS ETANÓLICOS
DE PROPÓLEOS PROVENIENTES DE URUGUAY**

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / , Chile

Nombre del orientado: Yisel Rodriguez

País: Chile

Palabras Clave: antioxidantes, fenoles

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Esta tutoría se realizó durante mi estadía sabática en la UCN Chile y defendida por la estudiante luego de mi regreso, en el 2011.

Estudio In Silico de los efectos de lactonas sesquiterpénicas en el Factor Nuclear kappa B (NF- κ B)

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / , Chile

Nombre del orientado: Luis Alejandro Castro

País: Chile

Palabras Clave: lactonas sesquiterpénicas antitumorales

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas anticancerígenas

Perfil polifenólico de extractos de propóleos uruguayos por HPLC y estudios de anclaje molecular (docking) con xantina oxidasa

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Programa: Bachiller en Química

Nombre del orientado: Cristhian Rojas

País: Uruguay

Palabras Clave: flavonoides, antioxidantes, docking

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofarmacia

Estructura De Polifenoles Presentes En Marcela Y Propóleos Y Su Relación Con Biomoléculas Involucradas En El Estrés Oxidativo

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Programa: Licenciatura en Química

Nombre del orientado: Manuel Cedrés

País: Uruguay

Palabras Clave: flavonoides, antioxidantes, QSAR

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofármacos, Nutraceuticos

Estructura de Polifenoles presentes en Productos Naturales y su relación con Biomoléculas involucradas en el stress oxidativo

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Programa: Bachiller en Química

Nombre del orientado: Loreto Calderón Cárdenas

País: Uruguay

Palabras Clave: flavonoides, productos naturales, QSAR, docking

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofármacos, Nutraceuticos

OTRAS

Abordaje in silico para la evaluación de la capacidad antihipertensiva de péptidos bioactivos

provenientes de la leche (2020 - 2022)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Antonella Alba
País: Uruguay
Palabras Clave: Péptidos bioactivos Bioinformática estructural
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas

Iniciación a la investigación
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Nombre del orientado: Pablo Miranda Fierro
País: Uruguay
Palabras Clave: orujos de uvas, antioxidantes, nanotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de extractos antioxidantes encapsulados a partir de desechos industriales
La orientación del estudiante se está haciendo con la co-tutoría de la Dra Helena Pardo del centro NANOMAT del Polo Tecnológico de la Facultad de Química

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Estudio de deshidrogenasas de kinetoplástidos como posibles blancos de acción farmacológica: articulación de estrategias bioinformáticas y de laboratorio húmedo (2024)

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Departamento DETEMA , Uruguay
Programa: Doctorado en Química
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: JOSUE BURNEO
País/Idioma: Uruguay,
Palabras Clave: deshidrogenasas Tripanosoma cruzi medicina química
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática / Medicina Química

Integración de citosina deminasas en nanomateriales híbridos (2023)

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / DETEMA / BIOINFORMATICA , Uruguay
Programa: Posgrado en Química
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad (M. PAULINO , CECILIA ORTIZ)
Nombre del orientado: Lucia Patron
País/Idioma: Uruguay,
Palabras Clave: Bioinformatica Deaminasas Biotecnología
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática - Biotecnología

Creacion de redes neuronales para la evaluacion de interacciones kinasas-ligando (2023)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de los Andes, Colombia / Facultad de Química , Colombia
Programa: DOCTORADO EN QUIMICA UNIANDES COLOMBIA
Tipo de orientación: Cotutor
Nombre del orientado: Marcia Yineth Castillo T
País/Idioma: Colombia,

Palabras Clave: KINASAS MACHINE LEARNING REDES NEURONALES

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / BIOINFORMATICA, MACHINE LEARNING

Estudio de la biosíntesis de Antocianos en Uvas Tannat y Búsqueda de Blancos Farmacológicos Mediante Articulación de Herramientas Computacionales y de Inteligencia Artificial (2022)

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / DETEMA - Bioinformática , Uruguay

Programa: Doctorado en Química

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Jorge Cantero

País/Idioma: Uruguay,

Palabras Clave: Vitis Vinífera Bioinformática Antocianos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática

Desarrollo de metodología de clasificación de variantes de significado incierto y no clasificadas mediante técnicas bioinformáticas y aplicación a la proteína Ataxia Telangiectasia-Mutated (2022)

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / DETEMA - Bioinformática , Uruguay

Programa: Maestría en Bioinformática

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Leonardo García

País/Idioma: Uruguay,

Palabras Clave: variantes de significado inciertocáncer Ataxia Telangiectasia-Mutated

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática

QUINONAS MULTI-DIANA PARA EL DESARROLLO DE FARMACOS TRIPANOSOMICIDAS (2019)

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Centro de Bioinformática - DETEMA , Uruguay

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Andrés Camilo Ballesteros

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Quinonas tripanosomicidas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Marcadores de accidentes cerebrovascular isquémicos (2018)

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Romina Medeiros

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: fibrinógeno in silico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Minado de información para detectar interacciones de ligandos con blancos farmacológicos (2017)

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Centro de Bioinformática - DETEMA , Uruguay

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Pablo García

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Minería de datos bioactividades bioinformática

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural
Los objetivos de esta Tesis son: Construir una herramienta que pueda ser utilizada por biólogos para descubrir nuevas interacciones entre ligandos y blancos farmacológicos a partir del análisis del texto de publicaciones científicas (papers y reviews), distinguiendo entre interacciones bien conocidas e interacciones que pueden ser inferidas a partir de los contenidos de los textos. Identificar nuevas interacciones entre fenoles y proteínas involucradas en procesos neurodegenerativos validando los resultados obtenidos por métodos de bioinformática estructural. Avanzar el estado del arte de los mecanismos de entrenamiento de algoritmos de minería de texto aplicados a documentación científica relacionada con interacciones moleculares aplicables a la biología humana.

Estudio de fenoles con actividad antioxidante y antiinflamatoria y su vinculación con el factor de transcripción NF-κB (2015)

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Emiliana Fariña

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: propóleos orujos de uvas NF-κB

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de Fitonutrientes

Screening Virtual, Farmacóforo, QSAR, docking y dinámica molecular de análogos de agonistas nicotínicos en modelos de receptores nicotínicos de acetilcolina (2011)

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias, Uruguay

Nombre del orientado: Gustavo Silva Bueno

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: in silico nicotínicos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de agonistas nicotínicos del nAChR

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural
Esta Tesis se encuentra suspendida a la espera de que el estudiante se libere de otros compromisos laborales.

GRADO

Estudios experimentales y diseño biomolecular de inhibidores de xantina oxidasa (2007)

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Magdalena Dalmás

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: xantina oxidasa

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Docking, Modelado Biomolecular, inhibición enzimática, flavonoides

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural
Esta Tesis está suspendida a la espera de que la estudiante libere otros compromisos laborales

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Investigador Nivel II del Sistema Nacional de Investigadores (2012)

(Nacional)

Agencia Nacional de Investigación e Innovación

Esta categorización ha sido extendida hasta la actualidad a través de renovaciones cada 4 años.

Investigador Nivel II del Sistema Nacional de Investigaciones (2009)

(Nacional)

Agencia Nacional de Investigación e Innovación

PRESENTACIONES EN EVENTOS

Tecnologías de revalorización de residuos y subproductos agroalimentarios (2023)

Congreso

Bioinformática estructural de compuestos bioactivos y dianas asociadas a su funcionalidad: estructura, conformaciones, propiedades fisicoquímicas, y medidas de energía libre de interacción.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 6

Nombre de la institución promotora: Departamento Cytal - Facultad de Química

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: bioinformatica alimentos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Participamos junto con Jorge Cantero, Integrante del Área Bioinformática DETEMA

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2023)

Encuentro

Abrazando ideas y tendiendo puentes entre las ciencias químicas, bioinformáticas y bioquímicas.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Programa de Desarrollo de Ciencias Básicas - Química

Alcance geográfico: Nacional Palabras Clave: bioinformática ciencias químicas biología computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Medicina Química, Bioinformática

Es un encuentro que nuclea investigadores, estudiantes y egresados de PEDECIBA Química

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2023)

Encuentro

Reactividad y modos de acción de p-furanquinonas sobre la Triparredoxina Peroxidasa Tipo Glutación Peroxidasa III (PxIII)

Uruguay

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química

Alcance geográfico: Nacional Palabras Clave: p-furanquinonas triparredoxina peroxidasaPxIII

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioquímica, Bioinformática

Este trabajo fue presentado por Facundo Barquet y en el participaron Andres Ballesteros-Casallas, Natalia Oddone, Marcelo A. CominI, Gerardo Ferrer Sueta y Margot Paulino

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2023)

Encuentro

Explorando los modos de acción y potenciales blancos moleculares de derivados de p-quinonas con actividad tripanocida

Uruguay

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química

Alcance geográfico: Nacional Palabras Clave: p-quinonas chagas trianotiona reductasa tripanocidas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Medicina Química,
Bioinformática
Este trabajo ha sido presentado por Andres Camilo Ballesteros y e el hemos participado Cristina Quiroga, Gian Pietro Miscione, Marcelo Comini y Margot Paulino

Primer Congreso Latinoamericano de Sustentabilidad y Sostenibilidad de Alimentos (CLASS2023) (2023)

Congreso
Aprovechamiento Sustentable de Orujos de Uva: Caracterización de Propiedades Bioactivas
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 10
Nombre de la institución promotora: Departamento de Ciencia y Tecnología de Alimentos de Facultad de Química (UdelaR). Dra. Adriana Gámbaro Presidente Comité Científico
Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: orujos de uvas analisis fisicoquimicos fenoles bioactivos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas
Este trabajo fue presentado por nuestra investigadora postdoctoral Nathalia ACEVAL y ha sido realizado en colaboracion con Emiliana FARIÑA, Eduardo BOIDO, Cecilia ABREU, Karen PERELMUTER, Marcelo COMINI, Mariela BOLLATI-FOGOLÍN, Carolina ECHEVERRY y quien suscribe.

Conesul Symposium on Biomolecular Simulations and the 8th Regional Meeting of the Brazilian Biophysical Society (2023)

Encuentro
"From the Medicinal Chemistry to AI: design of Novel antitripanosomatids".
Brasil
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 20
Nombre de la institución promotora: Universidad do Rio Grande do Sul
Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: Diseño de compuestos Bioactivos Redes Neuronales Bioinformática
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Medicina Química, Inteligencia Artificial, Bioinformática Estructurañ
Participacion como conferencista invitada

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2023)

Encuentro
Estudio de variantes identificadas de UFGT en Vitis vinifera L. cv. Tannat asociadas al desarrollo del color de los frutos
Uruguay
Tipo de participación: Otros
Carga horaria: 30
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química
Alcance geográfico: Nacional Palabras Clave: UFGT variantes en Vitis Viniferafenoles orujos de uvas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática, Genómica
Este trabajo fue presentado en modalidad Poster por nuestro estudiante de Doctorado Jorge Cantero

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2023)

Encuentro
Estudio del impacto de la presencia de residuos de 3-nitrotirosina en la interacción intermolecular del fibrinógeno humano mediante simulaciones de dinámica molecular
Uruguay
Tipo de participación: Otros
Carga horaria: 30
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química
Alcance geográfico: Nacional Palabras Clave: fibrina coagulacion nitrosacion de fibrinas

simulaciones de macromoléculas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bionformática, Biología/Bioquímica

Este trabajo fue presentado como exposición oral por nuestra estudiante de doctorado Romina Medeiros, y es una investigación llevada a cabo junto con Jorge Cantero, Andrés Ballesteros, y la Prof. Graciela Borthagaray

XLVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Página web quitel23.site (2023)

Congreso

Molecular dynamics simulation study of the impact of 3-nitrotyrosine residues within the intermolecular interaction pockets of human fibrinogen.

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Área Bioinformática - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: fibrina fibrinogeno nitrosación de tirosinas coagulación

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática, Biología/Bioquímica

Este trabajo ha sido presentado como exposición oral por parte de nuestra estudiante de doctorado Romina Medeiros y ha contado con la colaboración de Andrés Camilo Ballesteros, Jorge Cantero y la Prof. Graciela Borthagaray. Consultar página web quitel23.site

XLVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Página web quitel23.site (2023)

Congreso

Exploring the modes of action and potential molecular targets of p-quinone derivatives with trypanocidal activity

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 50

Nombre de la institución promotora: Área Bioinformática - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: tripanosomiasis chagas quinonas tripanotona reductasa

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Trabajo presentado por el estudiante de doctorado Andrés Camilo Ballesteros. Colaboración con Cristina Quiroga, Gian Pietro Miscione, Marcelo Comini

XLVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Página web quitel23.site (2023)

Congreso

Alchemical transformation for studying cis/trans (Z/E) isomerization of carotenoids.

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 50

Nombre de la institución promotora: Área Bioinformática - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: carotenoids alquímica transformaciones free energy cis trans isomerization

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas

Este trabajo fue presentado por nuestro estudiante Jorge Cantero y ha sido realizado en colaboración con Paula Mapelli Braham, Elena Quintero y el Prof. Antonio J. Melendez de la Universidad de Sevilla

XLVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Página web quitel23.site (2023)

Congreso

In-silico analysis of cytosine deaminases and its substrate 5-fluorocytosine prodrug
Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 50

Nombre de la institución promotora: Área Bioinformática - DETEMA - Facultad de Química ?
UdelaR

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: cytosine deaminases 5-fluorocytosine prodrug
Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas

Este trabajo ha sido presentado en modalidad poster por Lucia Patrón y Mathias Costa y esta
siendo realizado e colaboracion con Cecilia Ortiz y Lorena Bentancor de la Universidad ORT. Ha
sido galardonado con uno de los premios a mejor poster del evento.

XLVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Página web quitel23.site (2023)

Congreso

Development of a methodology for classifying variants of uncertain significance and unclassified
variants using bioinformatics techniques and application to the Ataxia Telangiectasia-Mutated
protein

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 50

Nombre de la institución promotora: Área Bioinformática - DETEMA - Facultad de Química ?
UdelaR

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: Ataxia Telangiectasia-Mutated protein
unclassified variants variants of uncertain significance

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática

Este trabajo ha sido presentado por nuestro estudiante de Maestría Leonardo García y se realiza en
colaboración con a Prof. Patricia Esperón

XLVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Página web quitel23.site (2023)

Congreso

Panel Women in Science: Barriers, Challenges and Joys

Uruguay

Tipo de participación: Panelista

Carga horaria: 4

Nombre de la institución promotora: Área Bioinformática - DETEMA - Facultad de Química ?
UdelaR

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: women joys challenges barriers

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas

Se promovio un interesante encuentro para conversar sobre los desafios, barreras y alegrías que
recibimos las mujeres en la ciencia. Se debatieron entre ambos generos, interesantes aspectos.

Free Radical International 21st Biennial Meeting (2023)

Encuentro

Impact of 3-nitrotyrosine residues in human fibrinogen structure studied by molecular dynamics
simulations

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Society for Free Radical Research International

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: free radical 3-nitrotirosina fibrinogeno

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática

Este trabajo fue presentado por nuestra estudiante de doctorado Romina Medeiros

Encuentro Nacional de Química ENAQUI (2023)

Encuentro

Variante de una citosina desaminasa para la conversión de 5-Fluorocitosina

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química

Alcance geográfico: Nacional Palabras Clave: 5-fluorocitosina citosina deaminasa

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas

Este trabajo fue presentado por nuestra estudiante de postgrado Lucía Patron y su desarrollo está siendo compartido con las Dras Cecilia Ortiz y Lorena Bentancor

XLVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina QUITEL (2023)

Congreso

In-silico analysis of cytosine deaminases and its substrate 5-fluorocytosine prodrug

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 50

Nombre de la institución promotora: Área Bioinformática - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: cytosine deaminase 5-fluorocytosine

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Este trabajo ha sido presentado por nuestros estudiantes de postgrado en Química Lucía Patron y Mathias Costa los cuales ganaron la distinción de uno de los mejores posters presentados. La investigación en todas sus fases está siendo realizada en cooperación con las Dras Cecilia Ortiz y Lorena Bentancor

#LatinXChem23 Conference (2023)

Congreso

Variante de una citosina desaminasa para la conversión de 5-Fluorocitosina

México

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 4

Nombre de la institución promotora: @LatinXChem

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: citosina deaminasa 5-fluorocitosina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

Conferencia virtual en la cual nuestra estudiante Lucía Patron ha participado. La investigación en su totalidad viene siendo realizada en colaboración con las Dras Cecilia Ortiz y Lorena Bentancor

IV Simposio Latinoamericano de Biocatálisis y Biotransformaciones (IV SiLaByB) en conjunto con III Jornada de Biocatálisis (JBiocat) (2022)

Congreso

Tripanosomiasis olvidadas: diseño asistido mediante ingeniería artificial, métodos in silico y experimentales de inhibidores de tripanotona sintética y/o tripanotona reductasa de T cruzi

Chile

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 32

Nombre de la institución promotora: SyLaBib Palabras Clave: tripanosomiasis quinonas

triptanotona reductasa machine learning medicina química

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Jornadas de Investigación del COBO - Computational Bio- Organic Chemistry Bogotá 12-19 de agosto de 2022 - 2nd COBO School (2022)

Encuentro

Se impartió una conferencia sobre nuestras investigaciones en desarrollo de medicamentos de cura de la enfermedad de Chagas y se realizaron entrevistas e intercambios con todos los integrantes

del grupo COBO, en particular con el Prof. Gian Pietro Miscione, Pietro Vidossich y Gilles Gasset.
Colombia
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 32
Nombre de la institución promotora: COBO - Computational Bio- Organic Chemistry Bogotá.
Universidad de Los Andes Palabras Clave: computacional bioinformatica tripanosomiasis
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática, Medicina Química

WCSC Practical Aspects of Drug Discovery: At the Interface of Biology, Chemistry and Pharmacology 13-18 November 2022 (2022)

Encuentro
Se impartió una conferencia describiendo nuestras investigaciones sobre el diseño de medicamentos contra la enfermedad de Chagas, y se realizaron encuentros con expertos en Farmacología asistentes al evento (Jeremy Burrows, Head of Drug Discovery, MMV (Medicines for Malaria Venture)
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 32
Nombre de la institución promotora: Instituto Pasteur Montevideo Palabras Clave: tripanosomiasis bioinformatica Medicina Química Drug Discovery
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Medicina Química, Bioinformática Estructural

XXXV Jornadas Nacionales de Hidatidosis y LVII Jornadas Internacionales de Hidatología, 23, 24 y 25 de noviembre de 2021 (2022)

Congreso
Predicción de epítopes de dos isoenzimas de Gliceraldehido-3-fosfato deshidrogenasa de Echinococcus granulosus reconocidas por anticuerpos de pacientes con equinococosis quística.
Argentina
Tipo de participación: Otros
Nombre de la institución promotora: XXXV Jornadas Nacionales de Hidatidosis y LVII Jornadas Internacionales de Hidatología, 23, 24 y 25 de noviembre de 2021 Palabras Clave: g3pdh equinococosis quística epítopes anticuerpos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformatica
Agüero FA, CAECIHS-UAI, CONICET, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina, facundo.aguero@uai.edu.ar Maglioco A, CAECIHS-UAI, CONICET, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina, afmag313@yahoo.com.ar Paulino M, DETEMA-Udelar, Montevideo, Uruguay, margot@fq.edu.uy Fuchs AG, CAECIHS-UAI, INP-Fatala Chaben, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina, fuchsaliciagraciela@gmail.com

X Jornadas de Jóvenes Investigadores, 3 y 4 de junio de 2021, Buenos Aires, Argentina. (2021)

Congreso
MODELIZACIÓN EN SÍLICO DE LA ENZIMA GLICERALDEHÍDO-3-FOSFATO DESHIDROGENASA DEL ECHINOCOCCUS GRANULOSUS S.L.G1 RECONOCIDA POR LOS ANTICUERPOS DE PACIENTES HUMANOS CON EQUINOCOCOSIS QUÍSTICA DE LOCALIZACIÓN HEPÁTICA. Formato: Póster digital. Autores: Agüero F.A.1,2, Andrea Maglioco1,2, Margot Paulino3, Alicia G Fuchs1,4 Afiliaciones: 1- Universidad Abierta Interamericana, Centro de Altos Estudios en Ciencias Humanas y de la Salud; (CAECIHS-UAI); 2- Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET); 3- Universidad de la República (UDELaR), Facultad de Química, Centro de Bioinformática, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA); 4- ANLIS-Malbrán, Instituto Nacional de Parasitología "Dr. Mario Fatala-Chaben".
Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias Veterinarias, Universidad de Buenos Aires. Palabras Clave: g3pdh modelizacion biomoleculagr echinococcus granulosus anticuerpos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática

Reunión Anual de Sociedades de Biociencias, 17-20 de noviembre de 2021, Buenos Aires, Argentina. (2021)

Congreso

INTRACELLULAR HISTONE H2A IS RECOGNIZED BY CE AND OTHER PARASITOSIS IMMUNE SERA.

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Investigación Clínica (SAIC), Sociedad Argentina de Inmunología (SAI), Asociación Argentina de Farmacología Experimental (AAFE), Sociedad Argentina de Nanomedicinas (NANOMED-ar). Palabras Clave: histone parasitosis inmune sera

Facundo Agüero^{1,2}, Andrea Maglioco^{1,2}, María Pía Valacco³, Alejandra Juárez Valdez¹, Margot Paulino⁴, Alicia G Fuchs^{1,5}. Afiliaciones: 1Universidad Abierta Interamericana, Centro de Altos Estudios en Ciencias Humanas y de la Salud (UAI-CAECIHS), Buenos Aires, Argentina, 2CONICET, Argentina, 3Centro de Estudios Químicos y Biológicos por Espectrometría de Masas (CEQUIBIEM), IQUIBICEN-CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales-UBA, Buenos Aires, Argentina, 4Centro de Bioinformática, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, 5Instituto Nacional de Parasitología?Dr Mario Fatała Chaben?, ANLIS?Malbrán, Buenos Aires, Argentina.

Reunión Anual de Sociedades de Biociencias, 17-20 de noviembre de 2021, Buenos Aires, Argentina. (2021)

Congreso

Los anticuerpos de pacientes con echinococcosis quística reconocen tres histonas H2A.

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Investigación Clínica (SAIC), Sociedad Argentina de Inmunología (SAI), Asociación Argentina de Farmacología Experimental (AAFE), Sociedad Argentina de Nanomedicinas (NANOMED-ar). Palabras Clave: echinococcosis quística histonas H2A anticuerpos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática

Maglioco A^{1,2}, Agüero F^{1,2}, Valacco MP³, Juárez Valdez A¹, Paulino M⁴, Fuchs AG^{1,5}

XXXV Jornadas Nacionales de Hidatidosis y LVII Jornadas Internacionales de Hidatología, 23, 24 y 25 de noviembre de 2021 (2021)

Congreso

ANCLAJE DE ALENDRONATO, ETIDRONATO E IBANDRONATO EN MODELO IN SILICO DE GLICERALDEHIDO-3-FOSFATO DESHIDROGENASA DE ECHINOCCOCUS GRANULOSUS EN SITIO ACTIVO Y CON SU SUSTRATO EL GLICEROL-3-FOSFATO.

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Hidatidosis, Universidad Nacional de Río Negro, Ministerio de Salud - Gobierno de Río Negro. Palabras Clave: anclaje g3pdh etidronato ibadronato

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática

Autores: Agüero FA^{1,2}, Maglioco A^{1,2}, Ballesteros Casallas AC³, Cantero J³, Paulino M³, Roldán EAJ¹, Fuchs AG^{1,4}. Afiliaciones: 1Universidad Abierta Interamericana, Centro de Altos Estudios en Ciencias Humanas y de la Salud (UAI-CAECIHS), 2CONICET, 3Centro de Bioinformática Estructural, Departamento DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, 11800 Montevideo, Uruguay, 4Instituto Nacional de Parasitología?Dr Mario Fatała Chaben?, ANLIS?Malbrán, Buenos Aires, Argentina.

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2021)

Encuentro

Dioxigenasas en humanos BCO1 y BCO2 y su interacción con carotenoides

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA-Química Palabras Clave: dioxigenasas in silico BCO1 BCO2 carotenoides

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática
Anabela Martínez, Margot Paulino, Fabio Polticelli. DETEMA-Bioinformática, Facultad de Química,
UdelaR, y Universitá Roma III

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2021)

Encuentro
Modelo biomolecular de fibrina
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química Palabras Clave: fibrina modelización
biomolecular in silico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Bioinformática
Romina Medeiros, Margot Paulino, Departamentos BioClin y DETEMA, Facultad de Química,
Uruguay

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2021)

Encuentro
Tripanosomiasis olvidadas: Articulación de estrategias in silico, in vitro y de inteligencia artificial
para el desarrollo de tripanosomatídeos
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química Palabras Clave: in silico in vitro
inteligencia artificial tripanosomatídeos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática
Margot Paulino

Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2021)

Encuentro
Péptidos bioactivos antihipertensivos y antioxidantes extraídos de suero lácteo
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química Palabras Clave: péptidos bioactivos
hidrolizado de suero lácteo in silico antihipertensivos antioxidantes
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Bioinformática
Antonella Alba y Margot Paulino

Woman in Bioinformatics in LA (2020)

Congreso
Trypanosomicidal ariloxy quinones: multiple and multitargetted action studies
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado Palabras Clave: Mujeres en la ciencia Bioinformática
Estructural Quinonas Trypanosoma cruzi
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Computación e Información / Bioinformática

Herramientas de modelado (bio)molecular como metodologías predictivas para la evaluación de impacto ambiental de xenobioticos (2020)

Encuentro
En la Unidad Teórica 3 se desarrollaron conceptos básicos sobre herramientas dirigidas a conocer
el espectro multi-dianas de los compuestos bioactivos y a medir sus interacciones (modelado
molecular, anclaje directo y reverso aplicado)
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 10
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química Palabras Clave: Xenobióticos Modelado
Biomolecular Bioinformática Estructural
Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática estructural
Este curso fue organizado por las Prof. Elena Alvareda y María Laura Lavaggi e impartido junto con los Asistentes Andrés Camilo Ballesteros y Jorge Cantero del Área Bioinformática del DETEMA.I

X International Conference on Bioinformatics Montevideo - Uruguay (2019)

Congreso
Pyrazole [1, 5-a] pyrimidines with antitumour activity: Receptor identification and derivative design.
Andrés Camilo Ballesteros Gian Pietro Miscione Pietro Vidossich Margot Paulino
Uruguay
Tipo de participación: Otros
Carga horaria: 2
Nombre de la institución promotora: Universidad de la República Palabras Clave: pirazolo-
pirimidinas anclaje reverso cancer
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural
El presentador del trabajo fue el M. Sc. Andrés Camilo Ballesteros

#SolBio+10: X Congreso Internacional de Bioinformática. Celebración de la creación de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática y de la Maestría en Bioinformática PEDECIBA-UdelaR (2019)

Congreso
Participo dirigiendo el trabajo presentado por la Lic Saira Cancela
Uruguay
Tipo de participación: Otros
Carga horaria: 3
Nombre de la institución promotora: Universidad de la República Palabras Clave: Echinococcus
granulosus transportador molecular modelling molecular dynamics
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias Biológicas / Bioinformática Estructural
Molecular modelling and docking studies of a novel Echinococcus granulosus with two DNA
binding domains nuclear receptor Saira Cancela, Margot Paulino, Adriana Esteves, Gabriela Alvite

#SolBio+10: X Congreso Internacional de Bioinformática. Celebración de la creación de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática y de la Maestría en Bioinformática PEDECIBA-UdelaR (2019)

Congreso
Dirijo el trabajo presentado por el Ing. Agr. Jorge Cantero
Uruguay
Tipo de participación: Otros
Carga horaria: 3
Nombre de la institución promotora: Universidad de la República Palabras Clave: Carotenoides
CCD4 dioxigenasas molecular dynamics interacción con membranas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias Biológicas / Bioinformática Estructural
Este trabajo ha sido presentado en el marco de la Tesis de Maestría de Jorge Cantero

Péptidos Bioactivos. Jornadas AUGM (2019)

Encuentro
Bioinformática aplicada a componentes bioactivos de alimentos
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: AUGM Palabras Clave: Péptidos Bioactivos Bioinformática
Estructural
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /
Bioinformática Estructural

Structure Based Drug Design (2019)

Congreso
Trypanosomicidal ariloxy quinones, trypanothione reductase and glucose 6-fosfate dehydrogenase:
multiple and multitargetted action studies
Italia
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Istituto Italiano de Tecnologia Palabras Clave: Quinonas tripanosomicidas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

#SolBio+10: X Congreso Internacional de Bioinformática. Celebración de la creación de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática y de la Maestría en Bioinformática PEDECIBA-UdelaR (2019)

Congreso

Maestría en Bioinformática - Celebración de sus X Años

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 50

Nombre de la institución promotora: UdelaR y Sociedad Iberoamericana de Bioinformática

Palabras Clave: Bioinformática Maestría en Bioinformática PEDECIBA-UdelaR Sociedad Iberoamericana de Biociencias

1st CIAPEP IBEROAMERICAN CONGRESS IN BIOACTIVE PEPTIDES (2019)

Congreso

Participo dirigiendo a Agustina Nardo y participando en las simulaciones in silico descritas en el resumen y a su vez siendo responsable del Proyecto que coordina y gestiona todas las acciones descritas en el trabajo de investigación

Brasil

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 2 Palabras Clave: bioactive peptides

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

V Iberoamerican Conference on Supercritical Fluids (V Prosciba), (2019)

Congreso

Stabilization of sunflower oil using supercritical crude extracts of native fruits from Uruguay. C. Dauber*, A. Rosso, E. Fariña, M. Paulino, I. Vieitez

Brasil

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brasil

Palabras Clave: Sunflower oil supercritical fluids

AOCS Latin American Congress and Exhibition on Fats, Oils and Lipids (2019)

Congreso

Evaluación del potencial antioxidante de extractos obtenidos a partir de frutos nativos de Uruguay mediante maceración con distintos solventes y extracción supercrítica. I. Vieitez, A. Rosso, E., E. Fariña, M. Paulino;

Brasil

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: The American Oil Chemists Society -AOCS Palabras Clave: antioxidante extraccion supercrítica

El trabajo fue presentado por el Dr. Ignacio Vieitez

1st CIAPEP IBEROAMERICAN CONGRESS IN BIOACTIVE PEPTIDES (2019)

Congreso

Structure-activity relationship of antioxidant peptides derived from the gastrointestinal digestion of amaranth proteins García Fillería, S. Paulino, M, Nardo, AE, Tironi, V

Brasil

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 3 Palabras Clave: peptidos bioactivos in silico qsar amaranth

El trabajo ha sido presentado por la Dra. Agustina Nardo

1st CIAPEP IBEROAMERICAN CONGRESS IN BIOACTIVE PEPTIDES (2019)

Congreso

Dynamic study of the mechanism of interaction of ALEP and VIKP with angiotensin-converting

enzyme (ACE). Nardo, AE; Paulino M; Añón, MC

Brasil

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 4 Palabras Clave: peptidos bioactivos ACE in silico Molecular Dynamics

El trabajo ha sido presentado por la Dra. Agustina Nardo

Jornada AUGM en la Universidad Nacional de Córdoba. Núcleo Interdisciplinario "Productos Naturales" (2018)

Encuentro

¿Bioinformática Aplicada a Productos naturales: Identificación de potenciales blancos de interacción con importancia farmacológica?

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: AUGM Palabras Clave: Productos Naturales Bioinformática Estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Bioinformática Estructural

En el evento se realizaron varias actividades, una de ellas fue la conferencia informada.

Adicionalmente se realizaron jornadas "Hands on" para adiestramiento de estudiantes de posgrado. Esa segunda actividad se llamó: ¿Bioinformática Aplicada a Productos naturales: Identificación de potenciales blancos de interacción con importancia farmacológica?

Productos Naturales como Potenciales Agentes Terapéuticos (2018)

Encuentro

PNs como moduladores de proteínas relacionadas a otras patologías. MD Santi y Margot Paulino y "Biotecnología en citrus (oxidasas CCDs), salud ocular (BOC1 y BOC2)"

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: AUGM Palabras Clave: Productos Naturales Bioinformática Estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Bioinformáticas Estructural

Fue una jornada de una semana en la que diferentes expositores pertenecientes al Núcleo Interdisciplinario de AUGM (Productos Naturales) realizamos intervenciones. Durante esas jornadas estuve a cargo de Talleres Hands On "Introducción en cuanto al uso de herramienta Bioinformática MOE" además de las dos intervenciones (conferencias) acá informadas.

QUITEL 2018 Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2018)

Congreso

"From the genome to the proteome: in silico strategies to pave the way for the discovery of new drugs"

Chile

Tipo de participación: Conferencista invitado Palabras Clave: Drug discovery molecular biomodeling molecular dynamics quinones carotenoids phenols

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

The fight against diseases needs that the whole academic community converges to the effort of finding new and promising therapeutic agents. The continuous development of tools to elucidate new biomolecular targets and molecular scaffolds of inhibitors is becoming crucial. The Ligand Based Drug Design (LBDD) strategy, predicting a set of bioactive molecules to be synthesized or extracted from natural sources, and/or the Structure Based Drug Design (SBDD), based on tridimensional structures of biomolecular targets, are useful to propose new and more qualified candidates to be developed as drugs. Time after time, the in silico results must be correlated with experimental ones. A synergistic academic interaction must emerge to assure a complete and high level of comprehension of the situation associated to the disease or health state that we are interested in treating. Herein, examples of this synergistic interactive strategies are presented, centred in the development of new ariloxyquinones as trypanosomicidal compounds, able to collaborate in the fight against Chagas Disease and Leishmaniasis, with putative repositioning to cancer [1,2,3]. A second case refers to the study of conformational maps and the reactivity of carotenoids in dioxidasas of CCD4 citrus family [4,5]. A third example will be shown about the

diversity of polyphenols and their multitargeted activity that triggers effects as antioxidants, anti-inflammatory and /or neuroprotectors[6].

South American Initiative in Molecular Simulations (SAIMS) (2018)

Encuentro

Structural Bioinformatics in the way of drug design

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Instituto Pasteur Montevideo Palabras Clave: Structure

Based Drug Design Ligand Based Drug Design

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Structural Based Drug Design 2017 (2017)

Simposio

Study of polyphenols with antioxidant and anti-inflammatory activity and their correlation with Nuclear Factor Kappa B Paulino, M.a Fariña, E.a, Daghero, H.b, Bollati-Fogolin, M.b, Cantero, Jc.a, Mascayano, C.d , Vega-Tejido, M.a Olea, C.e, Moncada, M.e

Suiza

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 30 Palabras Clave: antiinflamatorios polifenoles NFK-B

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Structural Based Drug Design 2017 (2017)

Simposio

DEVELOPMENT OF NEW ANTICHAGASIC DRUGS: REVERSE VIRTUAL SCREENING AND MOLECULAR DYNAMICS OF ARILOXY-QUINONES Brenda Vera, Fabio Polticelli, Andrea Cavalli and Margot Paulino

Suiza

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 30 Palabras Clave: quinonas chagas Anclaje reverso

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

ICS Symposium <http://www.icslucerne2017.org/> (2017)

Congreso

Study of the geometrical Isomerization of zeaxanthin by chemical and in silico approaches

Gutiérrez-Rodríguez FJ1, Cantero, J2 Mapelli-Brahm, P1, Benítez-González AM1, Stinco CM1, Paulino, M2 , Meléndez-Martínez AJ1

Suiza

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 5 Palabras Clave: carotenoides zeaxanthin análisis conformacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

Euroqsar 2016 (2016)

Congreso

REVERSE VIRTUAL SCREENING OF ARILOXY-QUINONES TO THE DISCOVERY OF NEW TARGETS FOR THE DEVELOPMENT OF NEW TRYPANOCIDAL DRUGS

Italia

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: European Federation for Medicinal Chemistry Palabras Clave:

Quinonas Tripanosomicidas Reverse Screening Bioinformática Estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioinformática Estructural

Nutraceuticals and Degenerative Diseases (2016)

Encuentro

Structural Bioinformatics applied to the study of molecular targets of bioactive compounds involved in neuroprotection

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: British Council UK Network - IIBCE Palabras Clave:

Enfermedades neurodegenerativas Bioinformática Estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Bioinformática Estructural

CHITEL 2015 Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2015)

Congreso

An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus

Italia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad di Torino - Italia Palabras Clave: molecular dynamics docking CCDs carotenoids Dioxygenases citrus

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Fitoquímicos en Agroalimentación y Salud (2015)

Congreso

Bioinformatics applied to the study of bioactive compounds in foods

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: CYTED - España Palabras Clave: structural bioinformatics carotenoids omics bioinformatics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

IBERCAROT 2014 (2014)

Encuentro

Structural Bioinformatics applied to the Carotenoids research

Costa Rica

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: CYTED - Spain Palabras Clave: structural bioinformatics carotenoids

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Department of Sciences, Roma Tre University Seminars (2014)

Seminario

New targets for old drugs: synthesis, in vitro and in silico strategies applied to the discovering of new targets of potent specific tripanosomicidal o-naphtoquinones

Italia

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Department of Sciences, Roma Tre University Palabras Clave: reverse virtual screening Chagas disease o-quinones

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

PRIMER ENCUENTRO RIOPLATENSE DE BIOLOGÍA XIV JORNADAS ANUALES DE LA SOCIEDAD

ARGENTINA DE BIOLOGÍA (2012)

Congreso

Bioinformática estructural aplicada al estudio de compuestos bioactivos contenidos en productos naturales

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 32

Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Biología Palabras Clave: Bioinformática

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Carotenoides como ingredientes de alimentos funcionales, que se celebrará en la Facultad de Farmacia de la Universidad de Sevilla ente los días 10 y 12 de septiembre de 2012. (2012)

Congreso

BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL APLICADA AL ESTUDIO DE CAROTENOIDES CONTENIDOS EN PRODUCTOS NATURALES

España

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: CYTED España Palabras Clave: carotenoides, bioinformática

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Meeting with graduate students of Roma 3 University (2012)

Seminario

Drug design methods available in the Structural Bioinformatic Center - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR

Italia

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Roma 3 University Palabras Clave: drug design, bioinformatics

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

ENQUI 2011 (2011)

Congreso

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs - fatty acids interactions Adriana Esteves^{1,*} and Margot Paulino Zunini^{2,*}

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Facultad de Química - PEDECIBA Palabras Clave:

Echinococcus granulosus transportadores de ácidos grasos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2010)

Congreso

Bioinformática y Diseño de Drogas. Mesa de Bioinformática. Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Maldonado, Piriápolis. Mayo 2010.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias Palabras Clave: bioinformática estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems (2010)

Simposio

Bioinformatics in Ligand-Based and Structure-Based Drug Design, Theoretical and Practical Course and Workshop. February 22th -March 5th, 2010.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay

Palabras Clave: Biomolecular Systems Drug Design

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Workshop on Molecular Simulation of Bio and Nano Particles (2009)

Simposio

In silico characterization of cytosine analogues into nicotinic Acetylcholine Receptors 3D Models.

Juan Andrés Abin-Carriquiry, Margot Paulino Zunini, Bruce K. Cassels, Federico Dajas.

Chile

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 32

Nombre de la institución promotora: Centro de Bioinformática y Simulación Molecular de la

Universidad de Talca Palabras Clave: nicotínicos in silico nanoparticulas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Conferencia (2008)

Encuentro

Presentación de resultados del proyecto CSIC-SP al sector Apícola uruguayo

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Fundación Zonamérica Palabras Clave: productos naturales propóleos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química de Antioxidantes

Simposio satélite Apiterapia. (2007)

Congreso

Estudios de fenoles presentes en propóleos

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Facultad de Veterinaria Palabras Clave: propóleos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química de Antioxidantes

M. Paulino Zunini. Montevideo

4° AFFASA Symposium. (2006)

Simposio

3.1.36 M. Paulino Zunini. Structure Activity Relationships of Polyphenols in Natural Products.

IIBCE. Montevideo. Uruguay. Conferencista Invitado. 2006

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: INSTITUTO DE INVESTIGACIONES BIOLÓGICAS CLEMENTE ESTABLE

A la puerta de los 100 años del conocimiento de una endemia americana ancestral. Balance y futuro, 1909-2006. Chagas, hacia el Siglo XXI. (2006)

Congreso

La enfermedad de Chagas.

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Instituto Mario Fatala Chabén Palabras Clave: Enfermedad de Chagas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de drogas

M. Paulino Zunini. Buenos Aires

SCIENTIFIC WORKING GROUP ON CHAGAS DISEASE (2005)

Simposio

Consensus statement: session 9 . Discovery Research and New Therapeutic tools

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: TDR, WHO/PAHO, CDIA L Flohe, R. Radi, M. Paulino, SCIENTIFIC WORKING GROUP ON CHAGAS DISEASE . Buenos Aires, 17-19 Abril 2005.

Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad, de Biotecnología de Productos/Recursos Naturales. (2005)

Encuentro

Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Ciencia Tecnología y Sociedad M. Paulino Zunini, Montevideo

Primer Congreso de Apicultura del Mercosur (2005)

Congreso

Estudios QSAR de polifenoles presentes en mieles y propóleos.

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Apícola Uruguaya Palabras Clave: bioinformática estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

Elena Alvareda, Manuel Cedrés Fernández, Lorena Shöderle, Cecilia Matonte, Loreto Calderón, Margot Paulino Zunini, 24-29 junio 2005. Punta del Este, Maldonado, Uruguay.

3.1.38 Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad - Biotecnología de Productos/Recursos Naturales; Ciencia Tecnología y Sociedad (2005)

Encuentro

3.1.38 M Paulino Zunini. Medicina Química de Antioxidantes: Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela. Conferencista invitado Uruguay; Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad - Biotecnología de Productos/Recursos Naturales; Ciencia Tecnología y Sociedad . Montevideo. 2005

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

3.1.44 Seminario sobre Hierbas Aromáticas, Medicinales y fitofármacos. Dirección de Programación Comercial. Ministerio de RREE. (2004)

Seminario

3.1.44 M. Paulino Zunini. Estrategias que colaboran en el aumento del valor agregado de los productos naturales. Conferencista Invitada. Seminario sobre Hierbas Aromáticas, Medicinales y fitofármacos. Dirección de Programación Comercial. Ministerio de RREE. Montevideo, Uruguay. 2004.

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 30

Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace (2004)

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace
Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: NASA USA - Facultad de Química /UdelaR M. Paulino Zunini,
Montevideo

Reunión de coordinación CYTED (2004)

Encuentro

3.1.48 Caracterización Estructural de Macromoléculas Biológicas de interés en la formulación de
droga antiparasitarias

Uruguay

Tipo de participación: Moderador

Carga horaria: 30

Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace (2003)

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace
Estados Unidos

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: NASA USA - Universidad de Alabama / Birmingham M. Paulino
Zunini

3.1.49 Curso Regional Investigación y desarrollo de fármacos antoprotzoarios. AMSUD-Pasteur. Facultad de Ciencias y de Química- UdelaR. Montevideo. Uruguay. 2003 (2003)

Simposio

3.1.49 Medicinal Chemistry based approach and target-based drug research for the design and
structure optimization of new compounds against Chagas disease

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: 3.1.49 Facultad de Ciencias y de Química- UdelaR.

Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace (2002)

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace
Costa Rica

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: NASA USA - EARTH Costa Rica M. Paulino Zunini

Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2002)

Congreso

Relaciones Estructura-Actividad para o-naftoquinonas tripanocidas

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias Palabras Clave: bioinformática
estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas

E. Alvareda, F. Iribarne, A. García, A.O.M. Stoppani, M. Paulino, 29-30 november 2002,
Montevideo-URUGUAY .

Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2002)

Congreso

Estudios de docking y PCA de fenotiazinas en los sitios activos de tripanotiona reductasa y
glutatión reductasa,

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias Palabras Clave: bioinformática
estructural

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
F. Iribarne, S. Aguilera, M. Murphy, A. O. M. Stopanni and M. Paulino, november 29-30 2002, Montevideo-URUGUAY

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2002)

Congreso
Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds.
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Nombre de la institución promotora: Facultad de Química Palabras Clave: bioinformática estructural
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
M. Paulino*, F. Iribarne, A. García Otero, E. Alvareda, E. Cabrera, H. Cerecetto, R. Di Maio, S. Aguilera, M. Murphy, C. Gastellú Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002

XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Montevideo. (2002)

Congreso
Relaciones Estructura-Actividad y estudio del Mecanismo de Acción de Flavonoides con propiedades reguladoras de la sobrevivencia y muerte celular
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Facultad de Química Palabras Clave: bioinformática estructural
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
Margot Paulino, Laura Lafon, Silvia Sepúlveda-Boza, Sara Aguilera-Morales y Federico Dajas. Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002.

XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. (2002)

Congreso
Estudios de docking de compuestos nitrofuránicos en tripanotona y glutatión reductasas: un análisis grafico.
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Facultad de Química Palabras Clave: bioinformática estructural
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
Federico Iribarne, Ana García Otero, Hugo Cerecetto, Sara Aguilera, Miguel Murphy y Margot Paulino. Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002.

X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2002)

Congreso
Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de la Tripanotona y Glutatión Reductasa,
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de biociencias Palabras Clave: bioinformática estructural
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
Federico Iribarne, Ana García Otero, Hugo Cerecetto, Mercedes González, Sara Aguilera, Miguel Murphy, Margot Paulino, 10-12 mayo 2002, Maldonado

Seminario (2001)

Seminario
Docking and Molecular Dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase

binding sites

Canadá

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Department of Chemistry and Biochemistry, Laurentian University M. Paulino Zunini

Seminario (1999)

Seminario

Modelado Biomolecular de proteínas. Aplicaciones al diseño de inhibidores enzimáticos y de proteínas que unen ADN

España

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Univ. de Granada.España. Instituto de Biotecnología Lopez Neira M. Paulino Zunini

Encuentro de Investigadores PEDECIBA Química. Montevideo (1998)

Encuentro

3.1.68 M. Paulino Zunini. Cuatro modelos de biomoléculas resueltos por Química Computacional: Tripanotona reductasa y Partícula nucleosomal de *T. cruzi*, EgDF1 y Malato deshidrogenasa de *E. granulosus*. Conferencista invitada. Encuentro de Investigadores PEDECIBA Química. Montevideo, Uruguay. 1998

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química

Workshop sobre Modelado Molecular. Química Computacional aplicada al estudio de pequeñas moléculas (1997)

Congreso

Química Computacional aplicada al estudio de pequeñas moléculas

Brasil

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Sociedad Brasileira de Cristalografía M. Paulino Zunini

Conference Summing up 10 years of Bilateral Research Cooperation. (1996)

Congreso

Diseño de Antichagásicos

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: SAREC M. Paulino Zunini

3.1.91 Sweden-Argentina-Uruguay Symposium. Molecular. Biochemical and Immunological Approaches to parasitic diseases. (1994)

Simposio

3.1.91 M. Paulino Zunini. Theoretical and experimental pharmacological approach to Chagas disease: specific action of new drugs against flavoenzymes of the parasitic related organisms and the mammalian hosts. Conferencista invitada Sweden-Argentina-Uruguay Symposium. Molecular. Biochemical and Immunological Approaches to parasitic diseases. Noviembre 1994. Montevideo.

Uruguay. 1994

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: SAREC

Simposio de la Asociación Médica Uruguaya (1993)

Simposio

3.1.99 M. Paulino Zunini. Estudio de nuevas drogas contra *T. cruzi*. Conferencista invitada. Simposio Enfermedad de Chagas en el Uruguay. Asociación Médica del Uruguay. Montevideo

Uruguay. 1993

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: Asociación Médica Uruguaya

Identificación del mecanismo de apertura pH dependiente de la envoltura del Virus Zika y otros Flavivirus (2018)

Candidato: Martín Soñora
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
M. PAULINO ZUNINI, Martín Graña, Pilar Moreno
Doctorado en Biología Celular y Molecular (PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español
Palabras Clave: Virus Zika coarse grain

Cribado molecular y fenotípico de compuestos con potencial efecto farmacológico contra enfermedades causadas por tripanosomátidos (2017)

Candidato: Diego Benítez
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
GAMBINO D, LABADIE, M. PAULINO ZUNINI
Pro.In.Bio Programa Para la Investigación en Ciencias Médicas / Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español
Palabras Clave: Tripanosomiasis, Leishmaniasis
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biomedicina

VALIDACIÓN DE LA GLUCOSA-6-FOSFATO DESHIDROGENASA DE TRYPANOSOMA CRUZI, COMO BLANCO PARA EL DISEÑO RACIONAL DE FÁRMACOS ANTICHAGÁSICOS. (2017)

Candidato: Cecilia Ortiz
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
M. PAULINO ZUNINI, Sergio Pantano, Carlos Robello
Doctorado en Biología Celular y Molecular (PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español
Palabras Clave: G6PDH tripanosoma cruzi
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias Biológicas / Biología Molecular, Mecanismos redox de tripanosomatídeos

Estudio de la capacidad ANTIOXIDANTE EN VINOS TINTOS URUGUAYOS (2015)

Candidato: Santiago Deicas
Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado
E. BOIDO, A MARTÍN, M. PAULINO ZUNINI
Ingeniería de Alimentos / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Agronomía / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español
Palabras Clave: antioxidantes vino
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Alimentos

Búsqueda de agentes anti Trypanosoma cruzi en plantas del Uruguay (2015)

Candidato: Javier Varela
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
M. PAULINO ZUNINI
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español
Palabras Clave: Trypanosoma cruzi Plantas del Uruguay
Áreas de conocimiento:

Doctorado en Ciencias Biológicas (2014)

Candidato: Agustín Correa
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
A BUSCHIAZZO, G GONZÁLEZ, P. AGUIAR, L. COITIÑO, M. PAULINO ZUNINI
Doctorado en Ciencias Biológicas / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español
Palabras Clave: cristalografía
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Cristalografía

No indica (2013)

Candidato: Mauricio Argimón
Tipo Jurado: Trabajo de conclusión de curso de Grado
M. PAULINO ZUNINI
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

MODELADO MOLECULAR DE PROCESOS RELACIONADOS A LA TRANSCRIPCIÓN DEL VIRUS VIH-1 (2012)

Candidato: Matias Machado
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
M. PAULINO ZUNINI
Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Modelización estructural de la interacción entre proteína quinasa dependiente de AMPc y la proteína core del virus de Hepatitis C (2011)

Candidato: Astrid Bradner
Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado
M. PAULINO ZUNINI
Licenciatura en Bioquímica / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español
Palabras Clave: virus Hepatitis C proteína quinasa
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

No indica (2010)

Candidato: Lucia Otero
Tipo Jurado: Otras
M. PAULINO ZUNINI
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

No indica (2007)

Candidato: Alicia Merlino
Tipo Jurado: Otras
M. PAULINO ZUNINI
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay
País: Uruguay

Idioma: Español

Generación de modelos de clasificación de actividades antichagásicas y estudio de mecanismos de acción: aplicación de la búsqueda de nuevos fármacos anti - Trypanosoma cruzi (2007)

Candidato: Mariana Boiani

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

M. PAULINO ZUNINI

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Generación de modelos de clasificación de actividades antichagásicas y estudio de mecanismos de acción: aplicación de la búsqueda de nuevos fármacos anti - Trypanosoma cruzi (2006)

Candidato: Mariana Boiani

Tipo Jurado: Otras

M. PAULINO ZUNINI

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Eflujo activo de antibióticos mediaa por el sistema MTRH-MtrC-MtrE en Neisseria gonorrhoeae (2005)

Candidato: Ana Acevedo

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

M. PAULINO ZUNINI

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico (2004)

Candidato: Pablo Denis

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

M. PAULINO ZUNINI

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Estudio químico y biológico de derivados de N- Óxidos de benzo[1,2 - d]imidazol y aza análogos (2003)

Candidato: Mariana Boiani

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

M. PAULINO ZUNINI

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Química en solución acuosa de dioxocomplejos de Re (V) (2002)

Candidato: Jorge Gancheff

Tipo Jurado: Otras

M. PAULINO ZUNINI

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico (2000)

Candidato: Pablo Denis

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

M. PAULINO ZUNINI

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de

la República / Facultad de Química / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Influencias de la destilación con vapor en las características fisicoquímicas y sensoriales de extractos acuosos de plantas nativas sudamericanas (1990)

Candidato: Marcelo Miraballes Reynoso
Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado
M. PAULINO ZUNINI
Ingeniería de Alimentos / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Análisis de la reactividad intrínseca de nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de fármacos anticancerígenos (Cisplatín y Mitomicina C) (1990)

Candidato: Alexandra Castro
Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado
M. PAULINO ZUNINI
Licenciatura en Bioquímica / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL

En mi calidad de investigadora, docente y coordinadora de la Maestría en Bioinformática PEDECIBA-UDelaR desde el 2011 al 2019, y titular por el área Química desde el 2010 en forma ininterrumpida, he contribuido con la evolución y consolidación de la disciplina, el colectivo y la identidad en Bioinformática en el Uruguay. En particular, de la carrera de posgrado, la que cuenta al presente con 100 inscriptos, 40 egresados y 23 Magister en Bioinformática titulados por PEDECIBA-UdelaR. Desde el 2013, y en forma ininterrumpida, soy responsable del Proyecto financiado por CAP-UDelaR "Maestría en Bioinformática" el cual sustenta junto con PEDECIBA la consolidación de la carrera. En el pasado octubre 2019, participé como Presidenta del X Congreso Internacional en Bioinformática de la Sociedad iberoamericana de Bioinformática, lo cual nos brindó una adecuada visibilidad a nivel internacional y una importante integración de la Bioinformática en las Américas y Europa. Mas recientemente, he tenido el honor de pertenecer a la organización y dirigir el congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, en su edición 46 ava, que además de ser significativamente vinculante (primer reunion post pandemia) permitió involucrar proactivamente a todo el grupo de la química-biología computacional con referentes a nivel mundial de todas nuestras tecnologías y desarrollo. He formado y dirijo el Área Bioinformática del Departamento DETEMA de la Facultad de Química. En esa área, ofrecemos 7 cursos de grado y 6 cursos de posgrado, con la reciente incorporación de una línea de formación en programación python e inteligencia artificial, lo cual conforma un proceso de formación desde el grado al posgrado que garantiza la competencia de nuestros egresados para el desarrollo de sus Tesis en Bioinformática (especialmente en el área Estructural). A nivel de investigación, desarrollo e innovación, el liderazgo de líneas de investigación en el diseño de nuevos compuestos bioactivos, (tripanosomicidas, anticancerígenos, bioactivos obtenidos a partir de productos naturales como péptidos lácteos, carotenoides, fenoles de propóleos y orujos, nos ha brindado una identidad a nivel nacional e internacional que abre oportunidades de intercambio desarrollo de conocimiento e integración de nuestros investigadores y RRHH en formación con otros grupos de investigación y mas recientemente, con empresas. En el último año se han consolidado dos nuevas líneas asociadas a la biocatálisis (galactosidasas) y a la biotecnología (incorporación de deaminasas a naomateriales) que nos están permitiendo nuevos vínculos dentro de UdelaR y Universidad ORT. También, en mi participación en el cogobierno universitario, al participar de Comisiones como Dedicación Total y Coordinadora Docente, así también como miembro titular y/o suplente de Claustro y Consejo por el orden docente, he colaborado a la construcción continua de nuestra institución universitaria. Con objetivo de colaborar con la pandemia articulé un grupo (Facultad de Química, Ingeniería, Arquitectura, Escuela Centro Diseño Industrial) para la producción de kits de hisopado para el diagnóstico de SARS-CoV-2 que ha concluido en la producción y entrega de 7500 kits y la transferencia tecnológica a empresas para su producción y comercialización.

PRINCIPALES LINEAS DE INVESTIGACIÓN (TITULO E INVESTIGADORES ASOCIADOS) ACTUALES DEL AREA BIOINFORMATICA:
DESARROLLO DE MODELOS MULTIESCALA (Sergio Pantanio, IPMON)
DESARROLLO DE MODELOS PARA EL ESTUDIO DE ENFERMEDADES CARDIOVASCULARES (Graciela Borthagaray- UdelaR)
CREACION DE REDES NEURONALES DEEP/REINFORCEMENT LEARNING PARA EL DESARROLLO DE

MEDICAMENTOS. Con consultorías no formales de desarrolladores de redes (Daniele Toti, Andrea Pozzi, Fabio Polticelli)

ANTIOXIDANTES, ANTIINFLAMATORIOS Y/O NEUROPROTECTORES A PARTIR DE PRODUCTOS NATURALES. PROPOLEOS Y ORUJOS DE UVAS (Marcelo Comini, Mariella Bollati (IPMON), Carolina Etcheverry (IIBCE), Adriana Gambaro (Cytal), Eduardo Boido (Cytal), Helena Pardo (PTP, UdelaR), Cecilia Da Silva (Centro Regional Tacuarembó, UdelaR), Jorge Cantero, Emiliana Fariña).

PEPTIDOS BIOACTIVOS DE AMARANTO Y LECHE (María Cristina Anzoñe, Universidad de La Plata, Alejandra Medrano, Cytal, Facultad de Química)

DIOXIDASAS DE CITRUS, HUMANAS, CAROTENOIDES, ANTIOXIDANTES Y SALUD OCULAR (María Jesús Rodrigo, INTA, Valencia, Antonio Melendez-Martínez, Universidad de Sevilla, España)

PRODUCTOS NUTRACEUTICOS A PARTIR DE FLAVONAS DE SINTESIS: María Gabriela Ortega y María Daniela Santi, Universidad Nacional de Córdoba y MF Troncoso, UBA, Argentina).

PRODUCTOS NUTRACEUTICOS A PARTIR DE STEVIA REBAUDIANA: Nathalia Aceval, Universidad del Este Paraguay y actual PostDoc del Área Bioinformática)

TRIPANOSOMIASIS, QUINONAS Y REDES NEURONALES (Marcelo Comini (IPMON), Cristian Salas, Ricardo Tapia (PUC, Chile), Gian Pietro Miscione (U de los Andes, Bogotá?), Pablo García (BCI, Chile), Carolina Mascayano (USACH, Chile).

TRIPANOSOMIASIS: Compuestos organometálicos. (Dinorah Gambino, Leticia Pérez, Gonzalo Scalse (UdelaR)).

TRIPANOSOMIASIS : Lactonas sesquiterpénicas (Manuela García/Viviana Nicotra, Universidad Nacional de Córdoba, Argentina)

TRIPANOSOMIASIS: INHIBIDORES DE TRIPANOTONA SINTETAZA- EbSelen/EbSulfur (Marcelo Comini, Andrea Medeiros)

TRIPANOSOMIASIS: INHIBIDORES DE TRIPAREDOXINA PEROXIDASA GLUTATION-LIKE. (Marcelo Comini, Natalia Odone, Gerardo Ferrer Sueta)

HIDATIDOSIS - ECHINOCOCCUS GRANULOSUS . Desarrollo de bioactivos mediante la investigación de la enzima Glucosa 3P deshidrogenasa de E Granulosus (Alicia Fuchs, Facundo Agüero).

COMPLEJO II . (Gustavo Salinas/Graciela Mahler, UdelaR)

HIDATIDOSIS - ECHINOCOCCUS GRANULOSUS, Histonas / Inmunobioinformática (Alicia Fuchs, Andrea Maglioco, Instituto Fátala Chaben y UBA, Argentina)

HIDATIDOSIS - ECHINOCOCCUS GRANULOSUS : Receptores nucleares (Gabriela Alvite y Adriana Esteves FCien, UdelaR)

CANCER: Derivados de purinas (Gian Pietro Miscione (U de los Andes Bogotá?), Cristian Salas (PUC) y Derivados de pirazolopirimidinas (GP Miscione)

CÁNCER - Desarrollo de metodología de clasificación de variantes de significado incierto y no clasificadas mediante técnicas bioinformáticas y aplicación a la proteína Ataxia Telangiectasia-Mutated. En colaboración con Patricia Esperón - Departamento BioClin y Leonardo García, Área Bioinformática, DETEMA, FQ,

BIOTECNOLOGÍA: Estudio de mecanismos de acción de galactidasas (Cecilia Porciúncula, Cecilia Giacomini, Gabriela Irazoqui, DepBio, Facultad de Química, UdelaR)

BIOTECNOLOGÍA: Estudios de mecanismos de acción para la integración de metil deaminasas en nanomateriales híbridos. (Lorena Bentancor, Cecilia Ortiza, ORT-UdelaR).

Información adicional

Dirección y participación en líneas de Investigación que abarcan Proyectos de investigación, desarrollo e innovación, finalizados o en ejecución, la mayoría de los cuales están o han sido financiados por fuentes nacionales e internacionales. Desarrollo, investigación e innovación en nuevos antitripanosomatídeos, antioxidantes, antiinflamatorios, neuroprotectores, anticancerígenos en varias líneas celulares (mamas, intestino, leucemia), basados en desarrollos a partir de productos naturales, principalmente fenoles contenidos en orujos de uvas, productos de síntesis (quinonas principalmente).

Actual líder del Área Bioinformática del departamento DETEMA de la Facultad de Química, con una estructura de dieciséis integrantes: G5 DT (la suscrita), G4 Prof Libre (Sergio Pantano), G3 postdoctoral (Nathalia Aceval), cinco Asistentes G2 Asistentes/Becarios de postgrado (Leonardo García, Andrés Camilo Ballesteros, Jorge Cantero, Pablo García, Romina Medeiros), tres Ayudantes G1/Pasantes pregrado/postgrado (Emiliana Fariña, Facundo Barquet, Marcia Yineth Rodríguez); cinco Pasantes externos (Facundo Agüero, Andrea Maglioco, Rodrigo Moreira, Einy Cedoya, Alejandra Juárez Valdez). Es de destacar que el único cargo presupuestado por UdelaR es el mío, siendo todos los demás sostenidos desde siempre por proyectos de investigación y becas extranjeras y nacionales.

Actuales participaciones y colaboraciones a las que he sido invitada: Dinorah Gambino, Cecilia Porciuncula, Nicolás Veiga, Pablo Denis, Pablo Dans por Uruguay; Pietro Vidossich y Andrea Pozzi por Italia; Cristian Salas, Carolina Mascayano y Danilo Gonzalez por Chile; Alicia Fuchs y Maria Gabriela Ortega por Argentina; Antonio Melendez Martinez por España.

Asociaciones con sector productivo: empresa Grupo Traversa y Vinofi SA.

Directora de 3 4 Tesis de Doctorado, Maestría y Pregrado, 24 de ellos concluídos . 80 articulos en revistas arbitradas mas 5 capítulos de libros, siendo Autor correspondiente y/o primer autor en mas del 50%. Mas de 150 trabajos en eventos nacionales e internacionales y mas de 42 conferencias la mayoría en eventos internacionales (de los que se informan en este CV el 80% de los mismos).

Coordinadora de la Maestría en Bioinformática PEDECIBA-UdelaR desde el 28 de junio 2011 e Integrante de la Comisión Coordinadora de la Maestría en Bioinformática, titular, desde octubre 2009 hasta la fecha. Actual ideóloga y miembro titular del diseño e implementación de carreras de Licenciatura y Doctorado en Bioinformática. Directora del departamento DETEMA 2019-2021. Miembro Suplente por el orden Docente en el Consejo de la Facultad de Química, Titular de la Comisión de Dedicación Total de la Facultad de Química (2004-2020), de la comisión COAED desde el 2010 y coordinadora de la misma desde el 2020, titular de la Comisión de Ingresos y de cursos de postgrado subarea Fisicoquímica de PEDECIBA Química.

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	216
Artículos publicados en revistas científicas	84
Completo	83
Resumen	1
Trabajos en eventos	120
Libros y Capítulos	5
Libro publicado	1
Capítulos de libro publicado	4
Textos en periódicos	4
Revistas	4
Documentos de trabajo	3
Completo	3
Otros tipos	13
PRODUCCIÓN TÉCNICA	13
EVALUACIONES	21
Evaluación de proyectos	9
Evaluación de eventos	1
Evaluación de publicaciones	6
Jurado de tesis	5
FORMACIÓN RRHH	35
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	24
Tesis de maestria	7
Tesis de doctorado	6
Tesis/Monografía de grado	9

Iniciación a la investigación	1
Otras tutorías/orientaciones	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	11
Tesis/Monografía de grado	1
Tesis de maestría	4
Tesis de doctorado	6